

## Salto de temperatura e pressão em problemas com transição de fase

Denize Kalempa<sup>1</sup> and Irina Graur Martin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciências Básicas e Ambientais, Escola de Engenharia de Lorena,  
Universidade de São Paulo, Lorena, 12602-810, Brasil. Email: kalempa@usp.br

<sup>2</sup>Aix-Marseille Université, CNRS, IUSTI UMR 7343, Marseille, 13453, France

**Resumo:** O objetivo do presente trabalho é calcular numericamente os coeficientes de salto de temperatura e pressão na evaporação/condensação em uma interface vapor-líquido, ou sublimação/deposição em uma interface vapor-sólido, utilizados nas condições de contorno para resolver as equações de Navier-Stokes-Fourier em sistemas com baixa ou moderada rarefação do gás. A modelagem é feita com base em um modelo cinético para a equação integro-diferencial de Boltzmann linearizada com condição de contorno de completa ou parcial evaporação/condensação na interface. O método iterativo de velocidades discretas é utilizado para resolver o problema numericamente. Como resultados, os valores dos coeficientes de salto de temperatura e pressão são apresentados para diferentes valores de coeficientes de evaporação/condensação na interface e os perfis de temperatura e pressão na camada de Knudsen (camada adjacente à interface cuja espessura é da ordem de grandeza do livre caminho médio molecular) são mostrados.

**Palavras-chave:** transição de fase; equação de Boltzmann; salto de temperatura e pressão.

**Abstract:** The aim of the present work is to calculate the temperature and pressure jump coefficients in evaporation/condensation at the vapor-liquid interface, or sublimation/deposition at the vapor-solid interface, used in the boundary conditions to solve the Navier-Stokes-Fourier equations in low or moderate rarefied gas systems. The calculation is based on a kinetic model for the linearized Boltzmann equation subject to complete or partial phase transition at the interface. The discrete velocity method is applied to solve the problem numerically. As results, the jump coefficients are presented for some values of evaporation/condensation coefficient at the interface. Moreover, the temperature and pressure profiles in the Knudsen layer (a thin layer with thickness of a few free molecular paths) are shown.

**Keywords:** phase transition; Boltzmann equation; temperature and pressure jump.

### 1 Introdução

Em teoria cinética dos gases, problemas que envolvem evaporação/condensação têm sido estudados por muitos autores com base na equação de Boltzmann [1] e no método de simulação direta de Monte Carlo [2]. O número de Knudsen, denotado por  $Kn$  e definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do sistema gasoso em estudo, é o parâmetro utilizado para

caracterizar o grau de rarefação do gás. Para sistemas gasosos com  $Kn \ll 1$ , a hipótese de meio contínuo é válida e, consequentemente, as equações de Navier-Stokes-Fourier podem ser aplicadas. Entretanto, é necessário aplicar condições de contorno apropriadas que levem em consideração os efeitos de rarefação do gás, e.g. saltos das grandezas termodinâmicas como pressão e temperatura na interface. Para sistemas gasosos com  $Kn \gg 1$ , o livre caminho médio molecular é muito grande em

comparação com o comprimento característico do problema e, conseqüentemente, as equações da mecânica dos meios contínuos não são válidas para descrever os fenômenos de interesse. Nesse caso, denominado de regime de moléculas livres, as interações intermoleculares podem ser desprezadas e a interação gás-superfície é predominante. Quando  $Kn \sim 1$ , o regime é denominado de regime de transição. Em ambos os casos  $Kn \gg 1$  e  $Kn \sim 1$ , uma abordagem microscópica, e.g. teoria cinética dos gases ou dinâmica molecular, deve ser utilizada para descrever os fenômenos de interesse.

Em problemas que envolvem transição de fase em sistemas com baixa ou moderada rarefação do gás, correspondendo a  $0 < Kn \leq 0.1$ , as equações de Navier-Stokes-Fourier, amplamente conhecidas e utilizadas na engenharia, podem ser utilizadas desde que condições de contorno apropriadas de salto de temperatura e pressão na interface sejam utilizadas. A condição de continuidade da temperatura e da pressão na interface vapor-líquido ou vapor-sólido não é válida porque existem saltos dessas grandezas em condições de não-equilíbrio termodinâmico. Os coeficientes de salto de temperatura e pressão são obtidos via métodos de teoria cinética ou experimentalmente. Geralmente, os valores teóricos obtidos por Cipolla *et al.* [3] para os coeficientes de salto de temperatura e pressão são utilizados. De fato, existe escassez de dados na literatura para os coeficientes de salto de temperatura e pressão. Cipolla *et al.* usaram o método variacional para resolver o modelo proposto por Bhatnagar, Gross e Krook [4], denominado de modelo BGK, para a equação linearizada de Boltzmann. Nesse contexto, é importante mencionar que atualmente, apesar da infraestrutura computacional disponível para cálculo numérico, resolver a equação de Boltzmann ainda é um desafio. Devido a isso, modelos cinéticos que visam simplificar a equação de Boltzmann mantendo suas propriedades fundamentais, correspondendo à conservação de massa, momentum e energia, e o teorema H de Boltzmann equivalente à segunda lei da termodinâmica, ainda são muito utilizados. O modelo BGK também foi utilizado por outros

autores para obter os coeficientes de salto de temperatura e pressão usando outras abordagens numéricas, e.g. [5, 6]. Sone *et al.* [7] usaram a equação de Boltzmann na forma original para determinar os coeficientes de salto de temperatura e pressão devidos ao fluxo de massa na interface e mostraram que a diferença com os resultados obtidos via modelo BGK é aproximadamente 2%, fato que evidencia a vantagem de usar um modelo cinético (o custo computacional é menor).

No presente trabalho, os coeficientes de salto de temperatura e pressão são calculados numericamente com base no modelo proposto por Shakhov [8] para a equação de Boltzmann linearizada. De acordo com a literatura, o modelo de Shakhov é mais apropriado para modelar problemas que envolvem ambas as transferências de massa e calor. Como condição de contorno, transição de fase completa e parcial é assumida. Os coeficientes de salto de temperatura e pressão são tabelados em função do coeficiente de evaporação/condensação, ou sublimação/deposição, na interface. O perfil do desvio de temperatura do vapor em relação à temperatura da superfície líquida, ou sólida, é apresentado para a comparação teoria cinética versus mecânica dos meios contínuos.

## 2 Formulação do problema

Considera-se um gás no espaço semi-infinito  $x' > 0$  limitado por um plano da sua fase condensada em  $x' = 0$ . A superfície da fase condensada (líquido ou sólido) tem temperatura  $T_0$  e a pressão de saturação é  $p_0$ . A densidade de número de moléculas é denotada por  $n_0$  e  $p_0 = n_0 k T_0$ , com  $k$  denotando a constante de Boltzmann. Longe da interface, o gás está em equilíbrio termodinâmico com pressão  $p_\infty$ , temperatura  $T_\infty$ , densidade  $n_\infty$  e velocidade  $(U_\infty, 0, 0)$ . A transição de fase ocorre devido a pequenos gradientes de pressão e temperatura no vapor, na direção  $x'$ , os quais são denotados por  $X_P$  e  $X_T$  e definidos na equação (1).

$$X_P = \left| \frac{\ell_0}{p_0} \frac{dp}{dx'} \right| \ll 1, \quad X_T = \left| \frac{\ell_0}{T_0} \frac{dT}{dx'} \right| \ll 1 \quad (1)$$

A grandeza  $\ell_0 = \mu_0 v_0 / p_0$  é um comprimento equivalente ao livre caminho médio molecular, com  $\mu_0$  denotando a temperatura do vapor à temperatura  $T_0$ ,  $v_0 = \sqrt{2kT_0/m}$  é a velocidade molecular mais provável,  $m$  é a massa molecular.

Longe da fase condensada, no limite  $x' \rightarrow \infty$ , a pressão do gás é constante. Entretanto, a temperatura e a densidade são funções lineares de  $x'$ , dadas nas equações (2) e (3).

$$T(x') = T_w \left( 1 + \frac{x'}{\ell_0} X_T \right) \quad (2)$$

$$n(x') = n_w \left( 1 - \frac{x'}{\ell_0} X_T \right) \quad (3)$$

$T_w$  e  $n_w$  denotam a temperatura e a densidade do vapor na superfície condensada. Essas grandezas sofrem um salto na interface e, portanto, são escritas em termos dos coeficientes de salto de temperatura e densidade, denotados por  $\epsilon_T$  e  $\epsilon_n$ , conforme mostrado na equação (4).

$$T_w = T_0(1 + \epsilon_T), \quad n_w = n_0(1 + \epsilon_n) \quad (4)$$

Os coeficientes de salto de temperatura e densidade são calculados do ponto de vista macroscópica, ou seja, fora da camada de Knudsen, conforme mostrado nas equações (5) e (6).

$$\epsilon_T = \lim_{x' \rightarrow \infty} \left[ \frac{T(x') - T_{NJ}(x')}{T_0} \right] \quad (5)$$

$$\epsilon_n = \lim_{x' \rightarrow \infty} \left[ \frac{n(x') - n_{NJ}(x')}{n_0} \right] \quad (6)$$

As grandezas com índice  $NJ$  (No Jump) são calculadas das equações (2) e (3) assumindo  $T_w = T_0$  e  $n_w = n_0$ . É importante notar que os coeficientes de salto são calculados fora da camada de Knudsen, mas são utilizados em condições de contorno em  $x' = 0$ . Isso é justificado pelo fato de que a espessura da camada de Knudsen é muito pequena. O coeficiente de salto de pressão é calculado conforme mostra a equação (7).

$$\epsilon_P = \epsilon_T + \epsilon_n \quad (7)$$

O objetivo do trabalho é calcular os coeficientes de salto de temperatura e pressão,  $\epsilon_T$  e  $\epsilon_P$ , numericamente utilizando o modelo proposto por Shakhov para a equação de Boltzmann linearizada.

### 3 Metodologia

#### 3.1 Equação cinética

A linearização da equação de Boltzmann é feita usando a representação dada na equação (8) para a função de distribuição de velocidades moleculares.

$$f(x, \mathbf{c}) = f_0[1 + h^{(T)}(x, \mathbf{c})X_T + h^{(u)}(x, \mathbf{c})X_u] \quad (8)$$

Por conveniência, a coordenada  $x = x' / \ell_0$  e a velocidade molecular  $\mathbf{c} = \mathbf{v} / v_0$  adimensionais são introduzidas. As funções  $h^{(T)}(x, \mathbf{c})$  e  $h^{(u)}(x, \mathbf{c})$  são chamadas de perturbações causadas por  $X_T$  e  $X_u$ , definidos na equação (9).

$$X_T = \left| \frac{1}{\ell_0} \frac{dT_\infty}{dx} \right| \ll 1, \quad X_u = \left| \frac{U_\infty}{v_0} \right| \ll 1 \quad (9)$$

A função  $f_0$ , dada da equação (10), é a função de Maxwell na interface. Usando a representação dada em (8), o modelo de Shakhov para a equação de Boltzmann linearizada é escrito conforme mostra a equação (10).

$$c_x \frac{\partial h^{(i)}}{\partial x} = \nu^{(i)} + \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) \tau^{(i)} + 2c_x u^{(i)} + \frac{4}{15} c_x \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) q^{(i)} - h^{(i)}, \quad i = T, u \quad (10)$$

No lado direito da equação (10) aparecem as grandezas macroscópicas do vapor correspondendo aos desvios de densidade e temperatura dos valores na interface, velocidade e fluxo de calor na direção  $x$ , dados nas equações (11)-(14).

$$\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (11)$$

$$\tau^{(i)}(x) = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \int \left( c^2 - \frac{3}{2} \right) h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (12)$$

$$u^{(i)}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (13)$$

$$q^{(i)}(x) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int c_x \left( c^2 - \frac{5}{2} \right) h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (14)$$

### 3.2 Condição de contorno

Transição de fase completa ou parcial é assumida na interface, ou seja, em  $x' = 0$ . Assim, assume-se que uma fração  $\sigma$  das moléculas de vapor incidentes na superfície líquida ou sólida sofre transição de fase enquanto que o restante,  $1 - \sigma$ , sofre reflexão difusa. O coeficiente  $\sigma$  é chamado de coeficiente de evaporação/condensação ou sublimação/deposição. De acordo com a Ref. [9], em  $x = 0$ , a função de distribuição das moléculas emitidas da interface é dada conforme equação (15).

$$f(0, \mathbf{c}) = \sigma f_0 + (1 - \sigma) f_r, \quad c_x > 0 \quad (15)$$

A função  $f_r = n_r f_0 / n_0$  é a função de distribuição das moléculas que não sofrem transição de fase e são refletidas difusamente da superfície. Após introduzir a representação dada em (8) em (15), as condições de contorno para resolver as equações dadas em (10), para  $i = T, u$ , são obtidas conforme equação (16).

$$h^{(i)}(0, \mathbf{c}) = -(1 - \sigma) \xi^{(i)}, \quad i = T, u \quad (16)$$

A constante  $\xi^{(i)}$  é obtida da condição de impermeabilidade na superfície para as moléculas que não sofrem transição de fase. Essa constante é dada na equação (17).

$$\xi^{(i)} = \frac{2}{\pi} \int_{c_x < 0} c_x h^{(i)}(0, \mathbf{c}) e^{-c^2} d\mathbf{c} \quad (17)$$

### 3.3 Condição longe da interface

Longe da interface, no limite  $x' \rightarrow \infty$ , a função de distribuição de velocidades moleculares é dada pela solução de Chapman-Enskog [10]. Para o problema em questão, a solução de Chapman-Enskog permite encontrar os comportamentos assintóticos das funções de perturbação conforme mostrados nas equações (18) e (19).

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} h^{(T)}(x, \mathbf{c}) &= \epsilon_P^{(T)} + \left(c^2 - \frac{5}{2}\right) \epsilon_T^{(T)} \\ &+ \left(x - \frac{3}{2} c_x\right) \left(c^2 - \frac{5}{2}\right) \end{aligned} \quad (18)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} h^{(u)}(x, \mathbf{c}) = \epsilon_P^{(u)} + \left(c^2 - \frac{5}{2}\right) \epsilon_T^{(u)}$$

$$+ 2c_x \quad (19)$$

As representações dadas nas equações (20) e (21) foram usadas.

$$\epsilon_T = \epsilon_T^{(T)} X_T + \epsilon_T^{(u)} X_u \quad (20)$$

$$\epsilon_P = \epsilon_P^{(T)} X_T + \epsilon_P^{(u)} X_u \quad (21)$$

### 3.4 Método numérico

Como a solução do problema depende de 4 variáveis, especificamente a coordenada  $x$  e as componentes  $(c_x, c_y, c_z)$  da velocidade molecular, duas novas funções, dadas nas equações (23) e (24), são introduzidas com o objetivo de eliminar a dependência da solução numérica nas componentes  $c_y$  e  $c_z$  e, consequentemente, diminuir o custo computacional dos cálculos numéricos.

$$\phi^{(i)}(x, c_x) = \frac{1}{\pi} \int \int h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c_y^2 - c_z^2} dc_y dc_z \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(i)}(x, c_x) &= \frac{1}{\pi} \int \int h^{(i)}(x, \mathbf{c}) e^{-c_y^2 - c_z^2} \\ &(c_y^2 + c_z^2 - 1) dc_y dc_z \end{aligned} \quad (23)$$

Assim, podemos reescrever as equações cinéticas dadas em (10) como um sistema de equações, conforme mostrado nas equações (24) e (25).

$$\begin{aligned} c_x \frac{\partial \phi^{(i)}}{\partial x} &= \nu^{(i)} + \left(c_x^2 - \frac{1}{2}\right) \tau^{(i)} + 2c_x u^{(i)} \\ &+ \frac{4}{15} c_x \left(c^2 - \frac{3}{2}\right) q^{(i)} - \phi^{(i)} \end{aligned} \quad (24)$$

$$c_x \frac{\partial \psi^{(i)}}{\partial x} = \tau^{(i)} + \frac{4}{15} c_x q^{(i)} - \psi^{(i)} \quad (25)$$

As grandezas macroscópicas dadas em (11)-(14) também são reescritas em termos das novas funções conforme mostrado nas equações (26)-(29).

$$\nu^{(i)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int \phi^{(i)}(x, c_x) e^{-c_x^2} dc_x \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \tau^{(i)}(x) &= \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \int \left[ \left(c_x^2 - \frac{1}{2}\right) \phi^{(i)}(x, c_x) + \right. \\ &\left. \psi^{(i)}(x, c_x) \right] e^{-c_x^2} dc_x \end{aligned} \quad (27)$$

$$u^{(i)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x \phi^{(i)}(x, c_x) e^{-c^2} dc_x \quad (28)$$

$$q^{(i)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int c_x \left[ \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \phi^{(i)}(x, c_x) + \psi^{(i)}(x, c_x) \right] e^{-c_x^2} dc_x \quad (29)$$

As condições de contorno dadas em (16) são reescritas em termos das novas funções conforme mostrado nas equações (30) e (31).

$$\phi^{(i)}(0, c_x) = -(1 - \sigma)\xi^{(i)}, \quad c_x > 0 \quad (30)$$

$$\psi^{(i)}(0, c_x) = 0, \quad c_x > 0 \quad (31)$$

Similarmente, os comportamentos assintóticos mostrados em (18) e (19) são escritos em termos das novas funções conforme mostrado nas equações (32)-(35).

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi^{(T)}(x, c_x) = \epsilon_P^{(T)} + \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \epsilon_T^{(T)} + \left( x - \frac{3}{2} c_x \right) \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \quad (32)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi^{(T)}(x, c_x) = \epsilon_T^{(T)} + x - \frac{3}{2} c_x + 2c_x \quad (33)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi^{(u)}(x, c_x) = \epsilon_P^{(u)} + \left( c_x^2 - \frac{3}{2} \right) \epsilon_T^{(u)} + 2c_x \quad (34)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi^{(u)}(x, c_x) = \epsilon_T^{(u)} \quad (35)$$

As equações acopladas dadas em (24) e (25) sujeitas às condições dadas nas equações (30)-(35) são resolvidas numericamente via método de velocidades discretas, o qual é muito utilizado na área de teoria cinética dos gases e cujos detalhes podem ser encontrados na Ref. [11].

Usando as definições dadas nas equações (5) e (6), os coeficientes de salto de temperatura e densidade são calculados em termos dos desvios de densidade e temperatura conforme mostrado nas equações (36) e (37).

$$\epsilon_T^{(T)} = \lim_{x \rightarrow \infty} (\tau^{(T)} - x), \quad \epsilon_T^{(u)} = \lim_{x \rightarrow \infty} \tau^{(u)} \quad (36)$$

$$\epsilon_n^{(T)} = \lim_{x \rightarrow \infty} (\nu^{(T)} + x), \quad \epsilon_n^{(u)} = \lim_{x \rightarrow \infty} \nu^{(u)} \quad (37)$$

Portanto, a solução do modelo de Shakhov permite encontrar os perfis dos desvios de

temperatura e densidade dos respectivos valores na interface e, posteriormente, usando as equações (36) e (37) obter os coeficientes de salto de temperatura e densidade. Da equação (7), os coeficientes de salto de pressão são escritos conforme dados na equação (38).

$$\epsilon_P^{(T)} = \epsilon_T^{(T)} + \epsilon_n^{(T)}, \quad \epsilon_P^{(u)} = \epsilon_T^{(u)} + \epsilon_n^{(u)} \quad (38)$$

## 4 Resultados

A Tabela 1 mostra uma comparação com dados encontrados na literatura para o caso de completa transição de fase na interface. Os resultados apresentados por Pao [12], Cipolla *et al.* [3], Sone e Onishi [5] foram obtidos usando o modelo BGK e métodos numéricos diferentes. Além disso, Sone e Onishi [5] apresentam somente os coeficientes de salto devidos à força termodinâmica  $X_u$ , ou seja, somente o transporte de massa é considerado. Na Ref. [7], os coeficientes de salto foram obtidos via solução da equação de Boltzmann exata, ou seja, sem o uso de um modelo cinético para simplificar o termo colisional. De acordo com os dados da Tabela 1, os resultados obtidos no presente trabalho estão em boa concordância com os resultados obtidos pelos outros autores. Ademais, os resultados mostram que apesar do termo colisional das equações cinéticas utilizadas em diferentes trabalhos serem diferentes, os resultados obtidos para os coeficientes de salto são praticamente os mesmos. A comparação com os resultados da Ref. [7] mostra uma diferença de aproximadamente 0.5% para o coeficiente de salto de pressão e de aproximadamente 2% para o coeficiente de salto de temperatura. Isso mostra que os modelos cinéticos fornecem resultados em boa concordância com aqueles obtidos via equação de Boltzmann com a vantagem de um menor custo computacional.

A Tabela 2 apresenta os coeficientes de salto de temperatura e pressão na interface para alguns valores de coeficiente  $\sigma$ . Note que,  $\sigma = 1$  corresponde ao caso de completa evaporação/condensação ou sublimação/deposição na interface, enquanto que  $\sigma \neq 1$  significa que uma fração  $\sigma$  das moléculas incidentes sofre transição de fase e o restante,  $1 - \sigma$ , sofre reflexão difusa. Os resultados obtidos para  $\sigma=1$

Tabela 1: Coeficientes de salto de temperatura e pressão no caso de completa transição de fase ( $\sigma=1$ ).

Jump Coefficient	Present Work	Cipolla <i>et al.</i> Ref.[3]	Pao Ref.[12]	Sone/Onishi Ref. [5]	Sone <i>et al.</i> Ref. [7]
$\epsilon_T^{(T)}$	1.9540	1.9309	1.9540	—	—
$\epsilon_P^{(T)}$	0.8376	0.8385	0.8376	—	—
$\epsilon_T^{(u)}$	-0.4467	-0.4472	-0.4468	-0.4467	-0.4557
$\epsilon_P^{(u)}$	-2.1320	-2.1254	-2.1322	-2.1320	-2.1413

Tabela 2: Coeficientes de salto de temperatura e pressão na interface

$\sigma$	$\epsilon_T^{(T)}$	$\epsilon_P^{(T)}$	$\epsilon_T^{(u)}$	$\epsilon_P^{(u)}$
0.1	1.9540	0.8404	-0.4467	-33.9467
0.2	1.9540	0.8389	-0.4468	-16.3102
0.4	1.9540	0.8381	-0.4468	-7.4489
0.6	1.9540	0.8379	-0.4468	-4.4951
0.8	1.9540	0.8377	-0.4468	-3.0182
1.0	1.9540	0.8376	-0.4467	-2.1320

estão em boa concordância com os resultados apresentados nas Refs. [12, 3], os quais foram obtidos com base na solução numérica do modelo BGK e usando outras abordagens numéricas.

De acordo com os resultados tabelados, os coeficientes de salto de temperatura,  $\epsilon_T^{(T)}$  e  $\epsilon_T^{(u)}$ , não dependem do coeficiente  $\sigma$ , mas os coeficientes de salto de pressão,  $\epsilon_P^{(T)}$  e  $\epsilon_P^{(u)}$ , dependem desse coeficiente.  $\epsilon_P^{(T)}$  aumenta com a diminuição de  $\sigma$ , mas o desvio máximo da condição de completa transição de fase é menor que 0,5%. O coeficiente  $\epsilon_P^{(u)}$  é negativo e a sua magnitude aumenta com a diminuição de  $\sigma$ . Entretanto, um desvio em relação ao caso de completa transição de fase maior que 100% já é observado quando  $\sigma=0.6$ , ou seja, o coeficiente de salto de pressão devido à força termodinâmica  $X_u$  depende fortemente do coeficiente  $\sigma$  na interface.

Para mostrar a importância do uso dos coeficientes de salto de temperatura e pressão nas condições de contorno para resolver as equações da mecânica dos meios contínuos (MMC), os perfis dos desvios de temperatura e pressão em função da distância adimensional  $x$  devidos às forças termodinâmicas  $X_T$  e  $X_u$

são mostrados nas Figuras 1 e 2. Nesse contexto é importante mencionar que a solução das equações da MMC com condições de continuidade de temperatura e pressão na interface leva aos desvios de temperatura e pressão dado na equação (39).

$$\tau^{(T)}(x) = x, \quad \eta^{(T)} = 0 \quad (39)$$

Entretanto, quando a condição de salto de temperatura e pressão é considerada, esses perfis dependem dos coeficientes de salto conforme mostrado nas equações (40) e (41).

$$\tau^{(T)}(x) = \epsilon_T^{(T)} + x, \quad \eta^{(T)} = \epsilon_P^{(T)} \quad (40)$$

$$\tau^{(u)} = \epsilon_T^{(u)}, \quad \eta^{(u)} = \epsilon_P^{(u)} \quad (41)$$

Nas Figuras 1 e 2, as linhas sólidas em azul correspondem aos perfis obtidos via teoria cinética dos gases. As linhas tracejadas correspondem aos perfis obtidos via MMC com condição de continuidade da temperatura e pressão na interface (no jump - verde) e com condição de salto de temperatura e pressão na interface (jump - vermelho). De acordo com os perfis apresentados nas figuras, fora da camada de Knudsen, os perfis obtidos via teoria cinética dos gases e MMC com condição



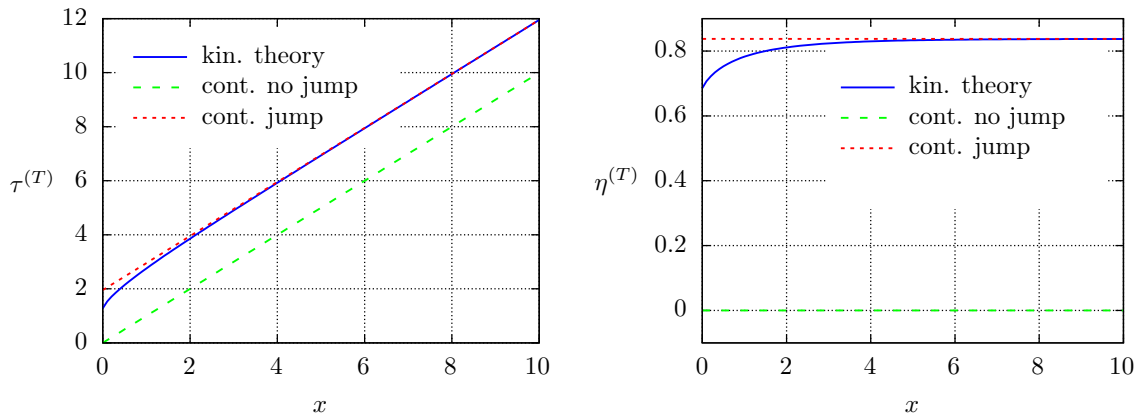


Figura 1: Desvios de temperatura e pressão devidos à força termodinâmica  $X_T$ .

de salto de temperatura e pressão na interface são os mesmos. Entretanto, se a condição de continuidade da temperatura e pressão na interface é utilizada, o perfil obtido via MMC não concorda com o perfil obtido via teoria cinética dos gases. Na camada de Knudsen, o perfil obtido via teoria cinética dos gases é o correto. Isso mostra a necessidade de corrigir a condição de contorno usando dos coeficientes de salto. Para sistemas gasosos com grau de rarefação baixo ou moderado, os efeitos na camada de Knudsen podem ser desprezados e, nessa situação é mais vantajoso utilizar a MMC com condição de salto de temperatura e pressão na interface. À medida que o número de Knudsen diminui a MMC torna-se inválida e outras abordagens devem ser utilizadas.

## 5 Conclusão

No presente trabalho os coeficientes de salto de temperatura e pressão em uma interface plana vapor-líquido ou vapor-sólido foram calculados numericamente usando o modelo cinético proposto por Shakhov para a equação de Boltzmann linearizada. Essa abordagem permitiu obter as grandezas macroscópicas do vapor, tais como os desvios de densidade e temperatura dos respectivos valores de temperatura na interface e pressão de saturação, os quais foram utilizados para calcular os coeficientes de salto de interesse. Os resultados obtidos mostram que o coeficiente de salto de pressão depende do coeficiente  $\sigma$ , o qual indica tran-

sição de fase completa ou parcial. Os perfis dos desvios de temperatura e pressão obtidos via teoria cinética dos gases e MMC com condição de salto de temperatura e pressão na interface mostram a importância da correta modelagem de problemas envolvendo transição de fase e o uso de novas abordagens.

## Agradecimentos

As autoras agradecem a Fundação de Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, processo 2022/10476-1) pelo auxílio financeiro concedido para a realização da pesquisa.

## Referências

- [1] C Cercignani. *The Boltzmann Equation and its Application*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [2] G A Bird. Comment on "False collision in the direct simulation Monte Carlo method" [Phys.Fluids 31,2047 (1988)]. *Phys. Fluids A*, 1(5):897, 1989.
- [3] J W Cipolla Jr, H Lang, and S K Loyalka. Kinetic theory of condensation and evaporation. II. *J. Chem. Phys.*, 61:69–77, 1974.
- [4] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. *Phys. Rev.*, 94:511–525, 1954.

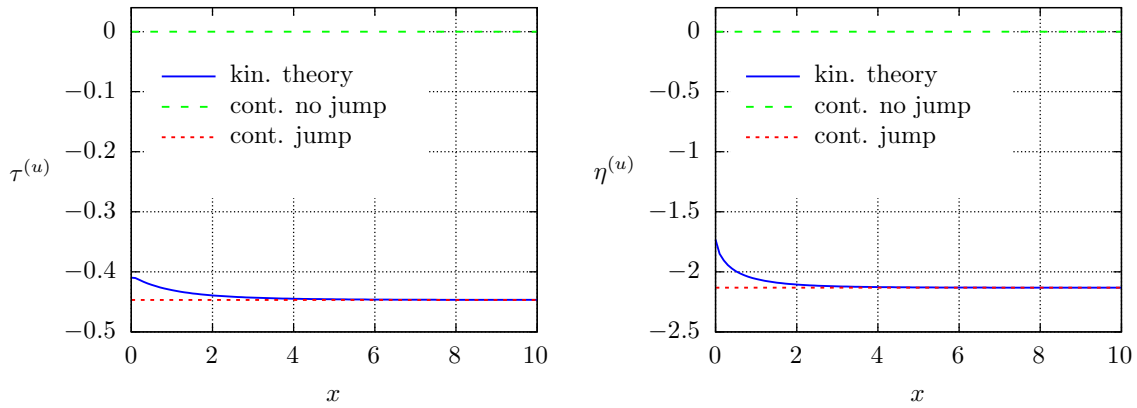


Figura 2: Desvios de temperatura e pressão devidos à força termodinâmica  $X_u$ .

- [5] Y Sone and Y Onishi. Kinetic theory of evaporation and condensation. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 35:1773–1776, 1973.
- [6] C E Siewert and J R Thomas. Half-space problems in the kinetic theory of gases. *Phys. Fluids*, 16:1557–1559, 1973.
- [7] Y Sone, T Ohwada, and K Aoki. Evaporation and condensation on a plane condensed phase: numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids A*, 1:1398–1405, 1989.
- [8] E M Shakhov. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, 3(5):95–96, 1968.
- [9] V B Leite, D Kalempa, and I Graur. Kinetic modelling of evaporation and condensation phenomena around a spherical droplet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 166:120719, 2021.
- [10] S Chapman and T G Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. University Press, Cambridge, 3 edition, 1970.
- [11] F Sharipov. *Rarefied Gas Dynamics. Fundamentals for Research and Practice*. Wiley-VCH, Berlin, 2016.
- [12] Y-P Pao. Temperature and density jumps in the kinetic theory of gases and vapors. *Phys. Fluids*, 14(7):1340–1346, 1971.