

Dalton Vinicus Kozak

*Simulação Direta de Monte Carlo de
Escoamentos Internos e Externos de Gases no
Amplio Intervalo de Rarefação com Aplicação a
Problemas da Engenharia Aeroespacial*

Curitiba

2010

Dalton Vinicus Kozak

*Simulação Direta de Monte Carlo de
Escoamentos Internos e Externos de Gases no
Amplio Intervalo de Rarefação com Aplicação a
Problemas da Engenharia Aeroespacial*

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção de grau de Doutor em Engenharia e Ciência dos Materiais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais - PIPE, do Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

Orientador:
Prof. Dr. Felix Sharipov

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Curitiba

2010

Tese de Doutorado sob o título “*Simulação Direta de Monte Carlo de Escoamentos Internos e Externos de Gases no Amplo Intervalo de Rarefação com Aplicação a Problemas da Engenharia Aeroespacial*” defendida por Dalton Vinicius Kozak e aprovada em 15 de dezembro de 2010, em Curitiba, Estado do Paraná, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Felix Sharipov
(Orientador, UFPR, Física)

Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos
(UFPR, Física)

Profa. Dra. Denize Kalempa
(UFSM, Engenharia Florestal)

Prof. Dr. José Viriato Coelho Vargas
(UFPR, Engenharia Mecânica)

Prof. Dr. Wilson Fernando Nogueira Santos
(INPE, Laboratório de Combustão e Propulsão)

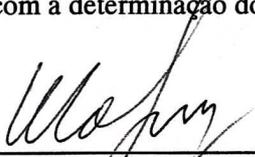


UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciências dos Materiais
Setor de Tecnologia

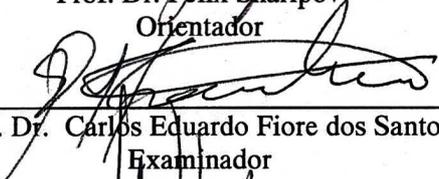
RELATÓRIO DE DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

Aos quinze dias do mês de dezembro de 2010, na sala PE-04 - no Centro Politécnico - UFPR, foi instalada pela Prof. Dr. Dante Homero Mosca Jr., coordenador do PIPE – Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais a Banca Examinadora para a quadragésima terceira defesa de tese de doutorado na área de concentração: Engenharia e Ciência dos Materiais. Estiveram presentes no ato, professores, alunos e visitantes. A Banca Examinadora, atendendo a determinação do colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia, foi constituída pelos professores doutores: Prof. Dr. Felix Sharipov (UFPR), Carlos Eduardo Fiore dos Santos (UFPR), José Viriato Coelho Vargas (UFPR), Wilson Fernando Nogueira dos Santos (INPE) e Denize Kalempa (UFMS). Às 10:00 horas, a banca iniciou os trabalhos, convidando o candidato **DALTON VINICIUS KOZAK** a fazer a apresentação da tese de doutorado intitulada “**SIMULAÇÃO DIRETA DE MONTE CARLO DE ESCOAMENTOS INTERNOS E EXTERNOS DE GASES NO AMPLO INTERVALO DE RAREFAÇÃO COM APLICAÇÃO A PROBLEMAS DA ENGENHARIA AEROESPACIAL**”. Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de arguição pelos membros participantes. Tendo em vista a dissertação e a arguição, a banca decidiu pela aprovação do candidato, (de acordo com a determinação dos artigos 68 e 69 da resolução 65/09 de 09.11.2009).

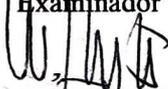
Curitiba, 15 de dezembro de 2010.



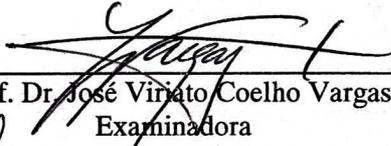
Prof. Dr. Felix Sharipov
Orientador



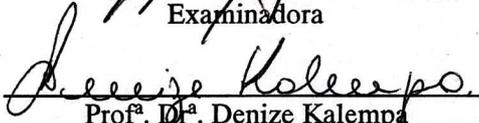
Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos
Examinador



Prof. Dr. Wilson F. N. dos Santos
Examinador



Prof. Dr. José Viriato Coelho Vargas
Examinadora



Prof.ª Dr.ª Denize Kalempa
Examinador

Agradecimentos

Pelo apoio à pesquisa:

- Agência Espacial Brasileira - Projeto SARA.
- CNPq (Edital Universal-2008).

Pelo apoio computacional:

- Laboratório Central de Processamento de Alto Desempenho (LCPAD/UFPR).

Pela orientação:

- Prof. Dr. Felix Sharipov.

Resumo

No presente trabalho foram calculados dois escoamentos relacionados a problemas da engenharia aeroespacial. Esses escoamentos foram estudados considerando uma ampla faixa de rarefação do gás, ou seja, considerando desde o gás com alta rarefação, onde praticamente inexistente a colisão entre as moléculas, até a condição onde a hipótese de meio contínuo passa a ser válida. Para análise desses escoamentos foi utilizada a Simulação Direta de Monte Carlo, técnica numérica adequada para o estudo de escoamentos como os que são abordados neste trabalho. O primeiro escoamento analisado, denominado interno, é o escoamento através de uma fenda com simetria plana que separa dois reservatórios com pressões distintas, escoamento conceitualmente equivalente aos escoamentos encontrados em nano e micro dispositivos propulsores. O fluxo de massa e parâmetros do campo de escoamento, como densidade e temperatura, foram determinados considerando o gás como sendo monoatômico. Obteve-se uma fórmula que interpola os dados numéricos do fluxo de massa através da fenda em função da razão de pressão entre os reservatórios e de um parâmetro que indica o nível de rarefação do escoamento. O segundo escoamento analisado, denominado externo, é o escoamento em torno de um satélite durante a reentrada atmosférica. A análise foi realizada para vôo hipersônico, sendo obtidos os coeficientes de pressão, atrito e de transferência de energia na superfície do satélite, bem como o coeficiente de arrasto, considerando-se o gás como sendo diatômico e não reativo. Para este último, uma fórmula de interpolação como função do parâmetro de rarefação foi obtida. Também o campo de escoamento foi determinado através das distribuições de densidade, temperatura e número de Mach local.

Abstract

In this work, two kinds of flows related to problems of aerospace engineering were calculated. The analysis has considered various levels of gas rarefaction, ranging from the highly rarefied gas, where practically no collisions occur between molecules, to the situation where the gas is considered as a continuous medium. To analyse the flows, the Direct Simulation Monte Carlo method was employed, which is the appropriate technique when the calculation of rarefied flows is involved. The first analysis concerns an internal flow, which is the flow through a thin slit with a plane symmetry placed between two reservoirs with different pressures. This flow is conceptually very similar to the flow that takes place in the nozzle of nano and micro propulsive devices. The mass flow rate and flow field parameters, like density and temperature, were determined with the gas considered as being monatomic. An analytical expression was proposed for the mass flow rate through the slit as function of a rarefaction parameter and the pressure ratio between the reservoirs. The second analysis was made on an external flow, the flow around a satellite during atmospheric re-entry. This analysis has covered the hypersonic regime, and the pressure, friction and energy transfer coefficients were calculated, together with the drag coefficient, considering the gas as being diatomic and non-reactive. For the drag coefficient an interpolating formula was proposed as a function of the rarefaction parameter. The flow field was also determined, and the distributions of density, temperature and local Mach number were given.

Lista de Figuras

1	Pioneiros da aviação e da astronáutica	p. 26
2	Lançadores de veículos espaciais.	p. 27
3	Trajétórias de lançadores e de veículos de reentrada.	p. 28
4	Escoamentos (a) externo e (b) interno.	p. 28
5	Problemas de engenharia aeroespacial.	p. 29
6	Micro-propulsor.	p. 30
7	Dimensões típicas de um micro-bocal convergente-divergente.	p. 31
8	Oscilação estatística da propriedade diminui à medida que o meio se torna contínuo.	p. 33
9	Escoamentos em micro-bocais e micro-turbinas podem ser rarefeitos. . .	p. 36
10	Aquecimento na extremidade da ogiva de veículos de reentrada.	p. 37
11	Escoamento de Couette (a) e de Poiseuille (b) com escorregamento; (c) salto de temperatura.	p. 39
12	Variação do número de Knudsen e modelos matemáticos adequados . .	p. 40
13	Modelo físico do escoamento através de uma fenda.	p. 41
14	Satélite SARA.	p. 42
15	Exemplos de função de distribuição de probabilidade.	p. 51
16	Função de distribuição normal reduzida.	p. 52
17	Distribuição de velocidade de Maxwell para nitrogênio obtida a partir da aplicação da equação (2.8).	p. 54
18	Fluxo molecular através de um elemento $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ do espaço de fase.	p. 56
19	Potenciais de interação.	p. 59
20	Dinâmica da colisão que altera a distribuição f no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) do espaço de fase no instante t	p. 60
21	Geometria da colisão e parâmetros de impacto b e ϵ	p. 61
22	Na interação gás-superfície, a velocidade de reflexão, \mathbf{v}^{ref} , é determinada a partir de uma distribuição de probabilidade.	p. 63
23	Cálculo do número π através de simulação de Monte Carlo.	p. 70
24	Distribuição normal gerada pelo método de aceitação-rejeição.	p. 73

25	Conceito de partícula modelo.	p. 77
26	Idéia básica do fenômeno físico no método DSMC.	p. 77
27	Algoritmo do método DSMC.	p. 78
28	Processo de indexação do algoritmo DSMC.	p. 80
29	Volume varrido por uma partícula teste de classe \mathbf{v}_t em relação a partículas de classe \mathbf{v} ($\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_t - \mathbf{v}$).	p. 81
30	Tipos de colisão.	p. 85
31	Definição do elemento de ângulo sólido $d\Omega$	p. 91
32	Geometria da colisão no modelo HS.	p. 92
33	Processo de “reposição” de partículas nas fronteiras abertas.	p. 96
34	Fluxo de partículas através de uma superfície.	p. 97
35	Componentes da velocidade da partícula injetada na fronteira.	p. 97
36	Raios de referência para fatores de peso.	p. 99
37	Fatores de peso compensam o menor número de partículas por célula na direção do eixo de simetria axial.	p. 99
38	Configuração geométrica da fenda.	p. 102
39	Grade de células utilizada na simulação do escoamento através da fenda.	p. 105
40	Divisão de zonas com pesos diferenciados na simulação do escoamento através da fenda.	p. 106
41	Mecanismo de duplicação e eliminação de partículas entre zonas de peso.	p. 106
42	Pontos calculados e respectivas curvas de ajuste para o fluxo de massa adimensional W através da fenda.	p. 111
43	Evolução qualitativa das linhas de corrente do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$	p. 113
44	Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.0$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).	p. 115
45	Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.1$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).	p. 116
46	Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.5$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).	p. 117
47	Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.7$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).	p. 118

48	Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.0$	p. 120
49	Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.1$	p. 121
50	Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.5$	p. 122
51	Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.7$	p. 123
52	Evolução qualitativa do campo de densidade do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$	p. 124
53	Evolução qualitativa do campo de temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$	p. 125
54	Forma e dimensões do SARA.	p. 129
55	Parâmetro s_n e quantidade $(V_x \pm U_\infty)$	p. 132
56	Esquema de células utilizado na simulação do escoamento em torno do SARA.	p. 134
57	Coefficiente de arrasto do satélite SARA.	p. 138
58	Ajuste do coeficiente de arrasto do satélite SARA conforme expressão (4.29).	p. 139
59	Coefficiente de pressão na ponta da ogiva do satélite.	p. 141
60	Comparação entre C_p calculado pela técnica DSMC e o previsto pela teoria Newtoniana.	p. 142
61	Coefficiente de atrito na ponta da ogiva do satélite.	p. 143
62	Coefficiente de transferência de energia na ponta da ogiva do satélite.	p. 144
63	Linhas de corrente para $Ma = 10$	p. 147
64	Linhas de corrente para $Ma = 20$	p. 148
65	Campo de densidade (ρ/ρ_∞) para $Ma = 10$	p. 149
66	Campo de densidade (ρ/ρ_∞) para $Ma = 20$	p. 150
67	Campo de temperatura (T/T_∞) para $Ma = 10$	p. 151
68	Campo de temperatura (T/T_∞) para $Ma = 20$	p. 152
69	Número de Mach local para $Ma = 10$	p. 153
70	Número de Mach local para $Ma = 20$	p. 154
71	Distribuição dos coeficientes de pressão, C_p , e atrito, C_f , ao longo da superfície do satélite para $Ma = 20$, $T_s/T_\infty = 1$ e $Re = 10000$ (gás monoatômico e diatômico - regime hidrodinâmico).	p. 158

72	Colisão binária - parâmetro de impacto b e ângulo de espalhamento χ	p. 180
73	Parâmetros geométricos que definem a grade de células.	p. 181
74	Regiões com menor e maior concentração de partículas modelo por célula.	p. 186
75	Linhas de corrente para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 188
76	Linhas de corrente para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 189
77	Campo de densidade ($den = \rho/\rho_0$) para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (molé- culas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 190
78	Campo de densidade ($den = \rho/\rho_0$) para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (molé- culas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 191
79	Campo de temperatura ($tem = T/T_0$) para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 192
80	Campo de temperatura ($tem = T/T_0$) para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).	p. 193
81	Parâmetros geométricos que definem a grade de células.	p. 194
82	Linhas de corrente para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 200
83	Campo de densidade ($dens = \rho/\rho_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 201
84	Campo de temperatura ($Temp = T/T_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 202
85	Número de Mach local para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$ e (a) $Re = 0.1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 203
86	Linhas de corrente para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 204
87	Campo de densidade ($dens = \rho/\rho_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 205
88	Campo de temperatura ($Temp = T/T_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 206
89	Número de Mach local para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 20$, (a) $Re = 0.1$ (molé- culas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).	p. 207

Lista de Tabelas

1	Comparação entre a técnica DSMC e a solução da equação cinética (SEC), e aplicação recomendada.	p. 67
2	Graus de liberdade vibracionais para o nitrogênio.	p. 84
3	Influência dos parâmetros de acomodação (α_n e α_t) e do modelo de interação molecular (HS e VHS) no fluxo de massa adimensional W através de orifício.	p. 105
4	Influência da variação do incremento de tempo Δt no fluxo de massa adimensional W através da fenda - $p_1/p_0 = 0$	p. 107
5	Fluxo adimensional de massa W versus parâmetro de rarefação δ e razão de pressão p_1/p_0	p. 109
6	Fluxo de massa adimensional W no limite $\delta \gg 1$ para fenda e orifício.	p. 110
7	Coefficientes para as equações (3.15) para $0 \leq p_1/p_0 \leq 0.7$	p. 110
8	Parâmetros alterados na simulação considerando gás monoatômico e gás diatômico.	p. 137
9	Valores numéricos do coeficiente de arrasto, C_D , para gás monoatômico e diatômico.	p. 156
10	Valores numéricos do coeficiente de pressão, C_p , nas proximidades do ápice da ponta da ogiva ($\theta \approx 0$) - gás monoatômico e diatômico.	p. 156
11	Valores numéricos do coeficiente de atrito, C_f , para $\theta = \pi/4$ - gás monoatômico e diatômico.	p. 157
12	Valores numéricos do coeficiente de transferência de energia, C_h , para $\theta \approx 0$ - gás monoatômico e diatômico.	p. 157
13	Resumo das diferenças relativas dos diversos parâmetros calculados para gás diatômico e monoatômico.	p. 158
14	Descrição dos parâmetros da simulação numérica do escoamento através da fenda.	p. 182
15	Influência do número inicial de partículas modelo, INM, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$	p. 182
16	Influência do nível de discretização, definido através de NCO, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $p_1/p_0 = 0.0$ e $DTM(\Delta t)=0.01$	p. 183
17	Influência do tamanho do campo à jusante, $NSXR \times NSYR$, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$	p. 184

18	Influência do tamanho do campo à montante, $NSL \times NSL$, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$	p. 185
19	Influência do intervalo de tempo adimensional, $DTM(\Delta t)$, no fluxo de massa adimensional W através da fenda; $p_1/p_0 = 0$; ΔW é a variação de W para cada valor de δ (DEL).	p. 185
20	Quantidade de partículas modelo por célula.	p. 186
21	Descrição dos parâmetros da simulação numérica do escoamento ao redor do satélite.	p. 195
22	Valores dos parâmetros da configuração de referência.	p. 195
23	Influência dos parâmetros DT e INM, regime de moléculas livres ($Re=0.1$). p.	196
24	Influência dos parâmetros DT e INM, regime hidrodinâmico ($Re=10000$). p.	196
25	Influência do volume do campo de escoamento, regime de moléculas livres ($Re=0.1$).	p. 196
26	Influência do volume do campo de escoamento, regime hidrodinâmico ($Re=10000$).	p. 197
27	Influência do parâmetro NCYB ($Ma = 10$, gás diatômico, satélite “frio”).	p. 197
28	Influência dos parâmetros γ e ω - gás monoatômico: $\gamma = 1.67$ e $\omega = 0.5$; gás diatômico: $\gamma = 1.4$ e $\omega = 0.75$ (N_2)	p. 198
29	Influência do tipo de colisões - apenas elásticas: $X_{inel} = 0.0$; parte in-elásticas: $X_{inel} = 0.2$	p. 198

Lista de Símbolos e Abreviaturas

Símbolos Romanos

<i>a</i>	Aceleração da partícula fluida, eq. (1.1)
<i>A</i>	Área frontal do satélite, eq. (4.11)
<i>A_{fr}</i>	Elemento de área de fronteira
<i>A_s</i>	Área do segmento de superfície
<i>b</i>	Parâmetro de impacto - distância entre trajetórias colisionais, Figura 20
<i>c</i>	Velocidade do som, eq. (4.1)
<i>C_D</i>	Coefficiente de arrasto, eq. (4.9)
<i>C_f</i>	Coefficiente de atrito ou fricção, eq. (4.14)
<i>C_h</i>	Coefficiente de transferência de energia, eq. (4.12)
<i>C_p</i>	Coefficiente de pressão, eq. (4.13)
<i>d</i>	Diâmetro da partícula
<i>d_{ref}</i>	Valor de referência do diâmetro da partícula
<i>E_c</i>	Energia pré-colisional do par de partículas
<i>E_c[*]</i>	Energia pós-colisional do par de partículas
<i>E_r</i>	Energia rotacional pré-colisional do par de partículas
<i>E_r[*]</i>	Energia rotacional pós-colisional do par de partículas
<i>E_{ri}</i>	Energia rotacional da partícula <i>i</i> antes da colisão
<i>E_{ri}[*]</i>	Energia rotacional da partícula <i>i</i> após colisão
<i>E_{ri}^{inc}</i>	Energia rotacional da partícula incidente na superfície
<i>E_{ri}^{ref}</i>	Energia rotacional da partícula refletida da superfície
<i>E_t</i>	Energia translacional relativa pré-colisional do par de partículas
<i>E_t[*]</i>	Energia translacional relativa pós-colisional do par de partículas
<i>E_{t,ref}</i>	Valor de referência da energia translacional relativa
<i>f(t, r, v)</i>	Função de distribuição de velocidades
<i>f</i>	Força de campo sobre a partícula fluida, eq. (1.1)

$f^M(\mathbf{v})$	Função de distribuição de velocidades de Maxwell, eq. (2.3)
F	Força de arrasto (módulo)
$F_{im}(r)$	Força de interação intermolecular (módulo)
F_N	Quantidade de partículas reais representada por uma partícula modelo
k	Constante de Boltzmann, $1.380658 \times 10^{-23} \text{J/K}$
Kn	Número de Knudsen
L	Comprimento característico do escoamento, comprimento do satélite
m	Massa da partícula
\dot{M}	Fluxo de massa por unidade de comprimento da fenda, eq. (3.4)
Ma	Número de Mach, eq. (4.1)
\dot{M}_{ml}	Fluxo de massa por unidade comprimento da fenda no regime de moléculas livres, $p_1/p_0 = 0$, eq. (3.3)
Ma_L	Número de Mach local
n	Densidade numérica (número de partículas por unidade de volume); tamanho da amostra
n_E, n_R	Densidades numéricas nas fronteiras dos reservatórios esquerdo e direito, respectivamente
n_f^+, n_f^-	Número de partículas que passam pela fenda nas direções à jusante e à montante, respectivamente, durante Δt
\dot{N}_A	Fluxo de partículas por unidade de área
N^+, N^-	Número de partículas que passam pela fenda nas direções à jusante e à montante, respectivamente, durante o tempo de acumulação estatística t
N_{col}	Número de colisões em uma célula, eq. (2.80)
N_E, N_R	Quantidade de partículas que adentram pelas fronteiras dos reservatórios esquerdo e direito, respectivamente
N_{fr}	Quantidade de partículas que entram no escoamento através de um elemento de área de fronteira num intervalo de tempo
N_p	Número de partículas em um célula em determinado momento
\bar{N}_p	Número médio de partículas em um célula até determinado momento
N_S	Quantidade de partículas que adentram pela fronteira superior (campo do satélite)
N_s	Número de partículas que colidem contra segmento de área A_s
N_T	Número de partículas reais
p	Pressão
p_0	Pressão no reservatório à montante da fenda

p_1	Pressão no reservatório à jusante da fenda
p_d	pressão dinâmica, eq. (4.10)
p_∞	Pressão do escoamento não perturbado
P	Probabilidade
P_{ij}	Tensor de pressões, eq. (2.11)
P_{max}	Probabilidade máxima
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
q_n	Fluxo de energia normal à superfície
$Q(ff_*)$	Termo colisional, eq. (2.23)
r	Distância intermolecular, eq. (2.24)
\mathbf{r}	Vetor posição
\mathbf{r}_i	Posição da partícula i
$\mathbf{r}_{i,new}$	Nova coordenada da partícula i
$\mathbf{r}_{i,old}$	Antiga coordenada da partícula i
R	Raio da base do satélite
R_{cl}	Núcleo de espalhamento de Cercignani & Lampis, eq. (2.45)
R_d	Núcleo de espalhamento difuso
R_{de}	Núcleo de espalhamento difuso-especular, eq. (2.44)
Re	Número de Reynolds, eq. (4.2)
$R(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref})$	Núcleo de espalhamento
S_r	Superfície do elemento de espaço físico
t	Tempo de acumulação estatística
T	Temperatura
T_{cg}	Temperatura cinética global, eq. (2.109)
T_r	Temperatura rotacional, eq. (2.107)
T_s	Temperatura da superfície do satélite
T_t	Temperatura translacional, eq. (2.106)
T_w	Temperatura da parede (superfície sólida)
T_∞	Temperatura do escoamento não perturbado
\mathbf{u}	Velocidade hidrodinâmica
U_∞	Velocidade do escoamento não perturbado
\mathbf{v}	Velocidade da partícula

\mathbf{v}^*	Velocidade pós-colisional da partícula, eq. (2.30)
v_0	Módulo da velocidade molecular mais provável à temperatura T_0
\mathbf{v}^{inc}	Velocidade da partícula incidente na parede
\mathbf{v}^{ref}	Velocidade da partícula refletida pela parede
\mathbf{v}_{cm}	Velocidade do centro de massa de um par de partículas (j, k)
\mathbf{v}_i	Velocidade da partícula i
v_i^{inc}	Módulo da velocidade da partícula incidente na superfície
v_i^{ref}	Módulo da velocidade da partícula refletida da superfície
\mathbf{v}_j	Velocidade da partícula j antes da colisão
\mathbf{v}_j^*	Velocidade da partícula j após a colisão
v_m	Módulo da velocidade mais provável de uma partícula à temperatura T , eq. (2.4)
v_n^{inc}	Componente normal da velocidade da partícula incidente na parede
v_n^{ref}	Componente normal da velocidade da partícula refletida da parede
v_{ni}^{inc}	Componente normal da velocidade da partícula incidente na superfície
v_{ni}^{ref}	Componente normal da velocidade da partícula refletida da superfície
\mathbf{v}_r	Velocidade relativa pré-colisional entre as partículas
v_{ri}	Componente da velocidade relativa entre partículas na direção i , $i = x, y, z$
$v_{r,ref}$	Valor de referência do módulo da velocidade relativa
\mathbf{v}_r^*	Velocidade relativa pós-colisional entre as partículas
v_t^{inc}	Componente tangencial da velocidade da partícula incidente na parede
v_t^{ref}	Componente tangencial da velocidade da partícula refletida da parede
v_{ti}^{inc}	Componente tangencial da velocidade da partícula incidente na superfície
v_{ti}^{ref}	Componente tangencial da velocidade da partícula refletida da superfície
v_{xi}^{inc}	Componente na direção x da velocidade da partícula incidente na superfície
v_{xi}^{ref}	Componente na direção x da velocidade da partícula refletida da superfície
\mathbf{V}	Velocidade peculiar, eq. (2.15)
V_C	Volume da célula
V_i	Componente da velocidade peculiar da partícula
W	Fluxo de massa adimensional através da fenda, eq. (3.4)

Z_R Número colisional de relaxação rotacional

Símbolos Gregos

α	Coefficiente de acomodação, eq. (2.44)
α_n	Coefficiente de acomodação da energia cinética do movimento normal, eq. (2.45)
α_t	Coefficiente de acomodação de momentum tangencial, eq. (2.45)
β	Inverso da raiz da velocidade mais provável de uma partícula, eq. (2.60)
χ	Ângulo de espalhamento, Figura 21
δ	Parâmetro de rarefação
$d\Omega$	Elemento de ângulo sólido, Figura 31
Δt	Intervalo de tempo na simulação
ϵ	Parâmetro de impacto - ângulo azimutal, Figura 21
ϵ_i	Energia interna de uma partícula
$\epsilon_{i,j}$	Energia interna da partícula j
γ	Razão dos calores específicos, c_p/c_v
φ^M	Função de distribuição de Maxwell para o módulo das velocidades, eq. (2.8)
λ	Livre caminho médio das moléculas
λ_∞	Livre caminho médio entre as moléculas no escoamento não perturbado
μ	Viscosidade absoluta
μ_0	Viscosidade absoluta do gás à temperatura T_0
ν	Frequência das colisões
ω	Expoente de temperatura na expressão de viscosidade, eq. (2.86)
Θ_v	Temperatura característica vibracional
ρ	Densidade (densidade absoluta da substância - massa específica, m/V)
ρ_∞	Densidade do escoamento não perturbado
σ	Seção transversal diferencial de choque, eq. (2.116)
σ_M	Seção transversal de difusão ou transferência de momento
σ_T	Seção transversal total de choque
$\sigma_{T,ref}$	Valor de referência da seção transversal total de choque
σ_μ	Seção transversal de viscosidade, eq. (2.120)
τ_R	Tempo de relaxação rotacional

ς	Número de graus de liberdade associado aos modos de energia interna
ς_r	Número de graus de liberdade rotacionais
ς_v	Número efetivo de graus de liberdade vibracionais

Abreviaturas

DGR	Dinâmica dos Gases Rarefeitos
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
EB	Equação de Boltzmann
IAE	Instituto de Aeronáutica e Espaço
LCM	Livre caminho médio
MEMS	Microelectromechanical systems
MLB	Modelo de Larsen-Borgnakke
NEMS	Manoelectromechanical systems
SARA	SATélete de Reentrada Atmosférica

Sumário

1	Introdução	p. 24
1.1	Contextualização do Trabalho	p. 25
1.1.1	A Engenharia Aeroespacial	p. 25
1.1.2	Desafios da Engenharia Aeroespacial	p. 28
1.2	Dinâmica de Gases Rarefeitos	p. 31
1.2.1	Visão Geral	p. 31
1.2.2	Aplicações da Dinâmica dos Gases Rarefeitos	p. 35
1.2.3	Caracterização da Rarefação - Número de Knudsen	p. 38
1.3	Proposta deste Trabalho	p. 40
1.3.1	Considerações Gerais	p. 40
1.3.2	Micro-sistemas Propulsivos - Fendas	p. 41
1.3.3	Projeto SARA - Aerodinâmica de Satélite	p. 42
1.4	Revisão de Literatura	p. 43
1.4.1	Escoamento através de Orifícios e Fendas	p. 43
1.4.1.1	Orifícios	p. 43
1.4.1.2	Fendas	p. 45
1.4.2	Aerodinâmica de Satélite na Reentrada	p. 46
1.5	Organização da Tese	p. 47
1.6	Contribuição da Tese	p. 48
2	Metodologia de Cálculo	p. 50
2.1	Função de Distribuição de Probabilidade	p. 51

2.1.1	Visão Geral	p. 51
2.1.2	Distribuição Maxwelliana de Velocidades Moleculares	p. 52
2.2	A Equação de Boltzmann	p. 54
2.2.1	Descrição da Equação	p. 54
2.2.2	Termo Colisional	p. 57
2.2.2.1	Interação entre Partículas	p. 57
2.2.2.2	Dinâmica das Colisões	p. 59
2.2.3	Condição de Contorno - Interação Gás-superfície	p. 62
2.2.4	Métodos de Solução	p. 65
2.3	Métodos de Monte Carlo	p. 67
2.3.1	Visão Geral	p. 67
2.3.2	Breve Histórico	p. 68
2.3.3	Erro de Monte Carlo	p. 69
2.3.4	Gerador de Números Aleatórios	p. 71
2.3.5	Amostragem de Distribuições de Probabilidade	p. 72
2.3.6	Amostragem de Velocidade e Energia no Gás em equilíbrio	p. 74
2.4	Simulação Direta de Monte Carlo	p. 76
2.4.1	Visão Geral	p. 76
2.4.2	Algoritmo	p. 78
2.4.2.1	Etapa 1 - Movimento Livre	p. 78
2.4.2.2	Etapa 2 - Indexação das Partículas	p. 79
2.4.2.3	Etapa 3 - Colisões Intermoleculares	p. 80
	Seleção dos Pares Colisionais.	p. 80
	Dinâmica das Colisões Monoatômicas.	p. 83
	Dinâmica das Colisões Diatômicas.	p. 84
2.4.2.4	Etapa 4 - Cálculo das Grandezas Macroscópicas	p. 87

2.4.3	Modelos de Colisão	p. 89
2.4.3.1	Considerações Gerais	p. 89
2.4.3.2	Principais Modelos	p. 91
2.4.4	Fronteiras Abertas	p. 95
2.4.5	Fator de Peso	p. 98
2.4.6	Considerações sobre Fontes de Erros	p. 99
3	Escoamento através de Fenda	p. 101
3.1	Descrição do Problema	p. 102
3.2	Processo de Solução	p. 103
3.2.1	Parâmetros Determinantes do Escoamento	p. 103
3.2.2	Hipóteses e Parâmetros da Simulação DSMC	p. 104
3.2.3	Critério de Amostragem	p. 107
3.3	Resultados	p. 109
3.3.1	Fluxo de Massa	p. 109
3.3.2	Campo de Escoamento	p. 111
3.3.2.1	Linhas de Corrente	p. 111
3.3.2.2	Propriedades ao Longo do Eixo de Simetria	p. 114
3.3.2.3	Distribuições de Densidade e Temperatura	p. 119
3.4	Comentários e Discussão	p. 126
4	Aerotermodinâmica de Satélite	p. 127
4.1	Descrição do Problema	p. 128
4.2	Processo de Solução	p. 129
4.2.1	Parâmetros Determinantes do Escoamento	p. 129
4.2.2	Hipóteses e Parâmetros da Simulação DSMC	p. 131
4.2.3	Cálculo das Grandezas Macroscópicas	p. 135

4.2.4	Critério de Amostragem	p. 136
4.3	Resultados	p. 136
4.3.1	Observações gerais	p. 136
4.3.2	Coeficiente de Arrasto	p. 138
4.3.3	Coeficiente de Pressão	p. 139
4.3.4	Coeficiente de Atrito	p. 140
4.3.5	Coeficiente de Transferência de Energia	p. 140
4.3.6	Linhas de Corrente	p. 145
4.3.7	Distribuição de Densidade	p. 145
4.3.8	Distribuição de Temperatura	p. 146
4.3.9	Distribuição do Número de Mach Local	p. 146
4.3.10	Resultados Numéricos	p. 155
	4.3.10.1 Coeficientes Adimensionais	p. 155
	4.3.10.2 Comparação dos Resultados	p. 155
4.4	Comentários e Discussão	p. 159
5	Conclusão	p. 160
5.1	Considerações Gerais	p. 161
5.2	Sobre os Resultados	p. 161
	5.2.1 Escoamento através de Fenda	p. 161
	5.2.2 Aerodinâmica do veículo SARA	p. 162
5.3	Evolução Futura	p. 163
	Referências	p. 165
	Apêndice A – Modelo de Larsen-Borgnakke	p. 175
A.1	Resumo do Modelo	p. 175

Apêndice B – Seções Transversais de Colisão	p. 179
B.1 Coeficientes de Transporte em Gases	p. 179
B.2 Modelos de Colisão e as Áreas Transversais	p. 180
Apêndice C – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento através da Fenda	p. 181
C.1 Principais Parâmetros	p. 181
C.2 Influência dos Diversos Parâmetros	p. 182
C.3 Número de Partículas Modelo por Célula	p. 186
Apêndice D – Campo de Escoamento através da Fenda	p. 187
D.1 Linhas de Corrente	p. 188
D.2 Campo de Densidade	p. 190
D.3 Campos de Temperatura	p. 192
Apêndice E – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento ao redor do Satélite	p. 194
E.1 Principais Parâmetros	p. 194
E.2 Influência dos Diversos Parâmetros	p. 195
E.3 Influência do Modelo de Colisão	p. 198
Apêndice F – Escoamento ao Redor do Satélite	p. 199
F.1 Resultados para Satélite “Frio”	p. 200
F.1.1 Linhas de Corrente	p. 200
F.1.2 Campo de Densidade	p. 201
F.1.3 Campo de Temperatura	p. 202
F.1.4 Número de Mach Local	p. 203
F.2 Resultados para Satélite “Aquecido”	p. 204
F.2.1 Linhas de Corrente	p. 204

F.2.2	Campo de Densidade	p. 205
F.2.3	Campo de Temperatura	p. 206
F.2.4	Número de Mach Local	p. 207

1 *Introdução*

Neste capítulo é feita uma contextualização do presente trabalho. Primeiramente, o leitor é esclarecido sobre o que é a engenharia aeroespacial através de sua definição, um breve histórico e os principais desafios que se apresentam neste ramo da engenharia, os quais incluem, dentre vários, a análise de escoamentos de gases rarefeitos. A disciplina envolvida no estudo dessa classe de escoamentos, que é a Dinâmica de Gases Rarefeitos, é brevemente descrita, mostrando-se como um escoamento é caracterizado quanto ao nível de rarefação, e como isso pode influir no tratamento matemático utilizado para o cálculo do escoamento. Dentre os desafios citados, alguns mais específicos são descritos e, entre eles, quais foram escolhidos para serem abordados neste trabalho, junto com a respectiva revisão de literatura.

1.1 Contextualização do Trabalho

1.1.1 A Engenharia Aeroespacial

A engenharia aeroespacial é o ramo da engenharia envolvida em todas as fases de pesquisa, desenvolvimento e projeto na área da aeronáutica e da astronáutica, e agrupa duas outras especialidades: a engenharia aeronáutica e a engenharia astronáutica [1]. A engenharia aeronáutica trata basicamente de veículos que se deslocam na atmosfera (ar), ou seja, as aeronaves, das quais podemos citar como exemplos os planadores, os aviões, os helicópteros e os dirigíveis, entre outros. Já a engenharia astronáutica trata de veículos que se deslocam no espaço, como espaçonaves e satélites. Certamente existem áreas de interseção entre estas duas engenharias, posto que veículos podem trafegar da atmosfera para o espaço, e vice-versa, como é o caso de veículos lançadores e veículos de reentrada. São justamente estes veículos um dos principais focos de estudo e análise da engenharia aeroespacial.

Na engenharia aeronáutica os principais problemas recaem no projeto estrutural, propulsivo e aerodinâmico de uma aeronave visando cumprir uma determinada missão e atendendo certos parâmetros de desempenho, como velocidade e altitude de cruzeiro¹, capacidade de carga e de passageiros ou alcance, dentre outros [2]. A data de 17 de dezembro de 1903 é tida por muitos como o marco do início dessa modalidade de engenharia, quando do primeiro vôo de um veículo controlável mais pesado do que o ar, ocorrido na localidade de Kitty Hawk, Carolina do Norte, nos Estados Unidos, vôo este realizado pela aeronave denominada “Flyer”, construída pelos irmãos Orville e Wilbur Wright - Figura 1(a). Apesar da controvérsia em relação ao vôo do 14-Bis de Santos Dumont, realizado em 23 de outubro de 1906, este último é considerado o primeiro vôo homologado por um órgão oficial [3] (na época, a Comissão Oficial do Aeroclube da França), mas não foi o primeiro vôo de fato - Figura 1(b). A Federação Aeronáutica Internacional, na França, já reconhece os irmãos Wright como sendo os pioneiros [4], mas até hoje ainda existe alguma polêmica quanto a isso, especialmente por parte dos brasileiros.

Na engenharia astronáutica os requisitos estruturais e propulsivos também são importantes, mas a parte aerodinâmica passa a ter um papel irrelevante, visto que os veículos se deslocam na ausência de atmosfera.

¹A condição de cruzeiro é aquela condição onde ocorre uma combinação adequada de velocidade e de altitude que proporciona uma maior economia de combustível e um maior alcance da aeronave.

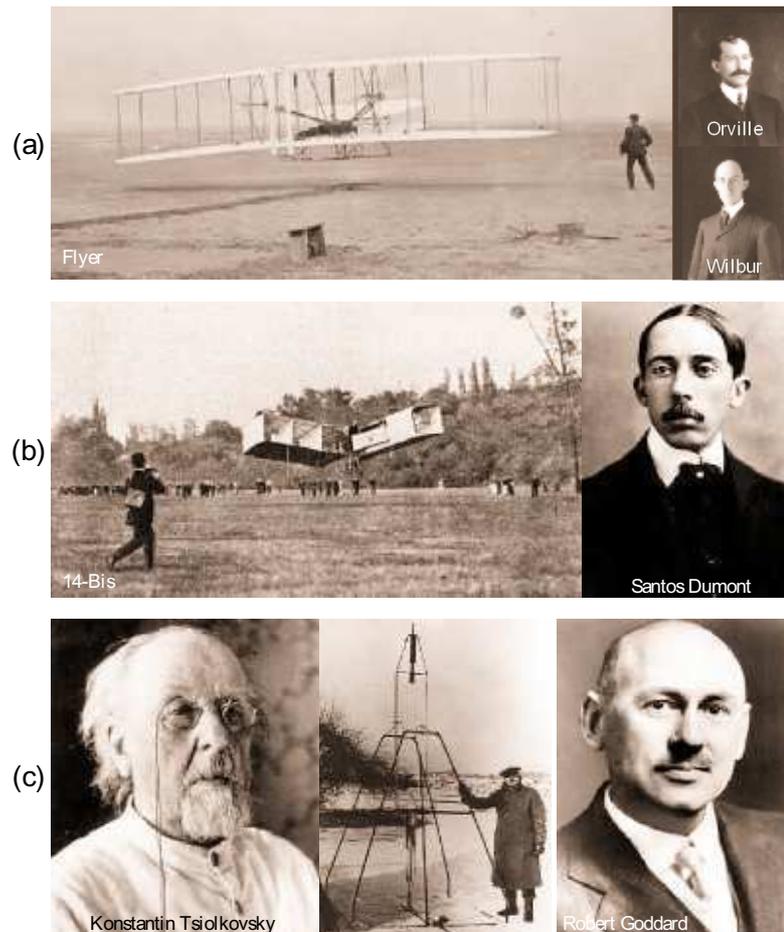


Figura 1: Pioneiros da aviação e da astronáutica

(a) Flyer e irmãos Wright; (b) 14-Bis e Santos Dumont; (c) Tsiolkovsky e Goddard

(Fonte: <http://pt.wikipedia.org/wiki>; acesso: 01/11/2010.)

Já a missão dos veículos lançadores é colocar uma carga paga em órbita como, por exemplo, satélites de telecomunicações [5], e nesse caso o veículo realiza seu vôo tanto através da atmosfera densa como através da atmosfera rarefeita, ou mesmo no vácuo. Em 16 de março de 1926 aconteceu o primeiro lançamento com sucesso de um foguete movido a propelente (combustível+comburente²) líquido, realizado pelo cientista americano Robert Goddard. Esta data é considerada como sendo o início da engenharia astronáutica, também chamada de ciência dos foguetes [6]. Porém, trabalhos teóricos importantes já existiam antes desse evento, como os de Konstantin Tsiolkovsky, que derivou a famosa equação do foguete [7] - Figura 1(c).

O termo engenharia aeroespacial acabou sendo cunhado em 1958 [1], justamente no ano em que a NACA, National Advisory Committee for Aeronautics, criada em 1915 com o intuito de fomentar as atividades aeronáuticas nos Estados Unidos (e da qual

²Exemplo: $H_2 + O_2$. A queima controlada do propelente impulsiona o foguete.

Orville Wright foi um dos fundadores e membro atuante por vários anos), se transformou na NASA, National Aeronautics and Space Administration. A NASA é uma das mais conhecidas agências de pesquisa e desenvolvimento aeroespacial do planeta, realizadora de grandes projetos, como o projeto Apollo e o projeto dos ônibus espaciais. Outras agências importantes são a Agência Espacial Federal Russa (ROSCOSMOS) e a Agência Espacial Europeia (ESA). No Brasil existe o Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE), em São José dos Campos, São Paulo. Na Figura 2 alguns dos lançadores das agências e institutos aqui citados são mostrados.

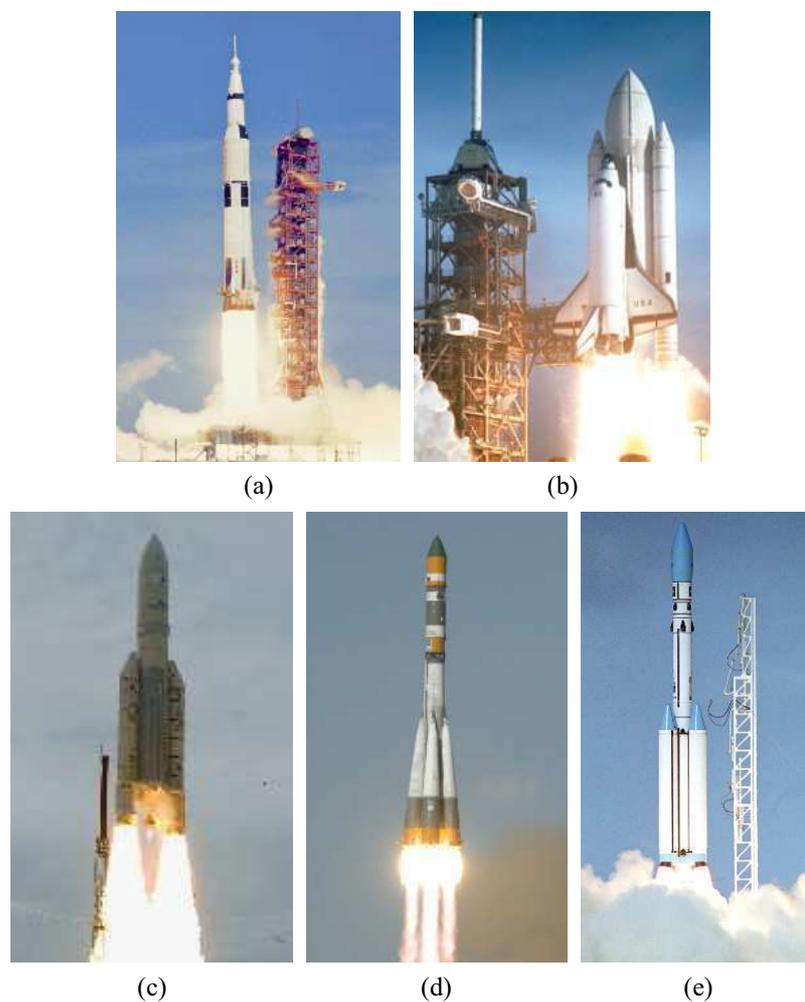


Figura 2: Lançadores de veículos espaciais.

(a) Saturno V (NASA), (b) ônibus espacial, SRBs (Solid Rocket Boosters) e tanque central (NASA), (c) Ariane 5 (ESA), (d) Soyuz-u (ROSCOSMOS) e (e) VLS-Veículo Lançador de Satélites (IAE)

(Fontes: (a,b): <http://www.nasa.gov/multimedia/imagegallery/>; (c): <http://www.esa.int/images>;

(d): <http://www.federalspace.ru>; (e): <http://www.iae.cta.br/fotos>; acessos: 01/11/2010.).

1.1.2 Desafios da Engenharia Aeroespacial

Não é preciso pesquisar muito para se perceber a grande amplitude de áreas envolvidas no desenvolvimento e projeto de aeronaves, foguetes, espaçonaves e satélites. Veículos aeroespaciais são submetidos a severas condições de vôo devido a significativas variações de pressão e temperatura, com cargas estruturais variadas sobre seus componentes, e precisam ser adequadamente controlados para manter um vôo seguro. Conforme mostrado na Figura 3, a trajetória desses veículos abrange desde a baixa atmosfera, densa, até a alta atmosfera e o espaço (vácuo), que são meios com características distintas entre si, e que alteram a forma de abordagem das soluções de engenharia. Assim sendo, veículos aeroespaciais são produtos da utilização e aplicação de várias tecnologias e disciplinas de engenharia, as quais incluem aerodinâmica, dinâmica dos gases, aviônica, ciência dos materiais, análise estrutural, tecnologias de propulsão e tecnologias de fabricação. O projeto de tais veículos é, portanto, resultado do trabalho de uma equipe multi-disciplinar.

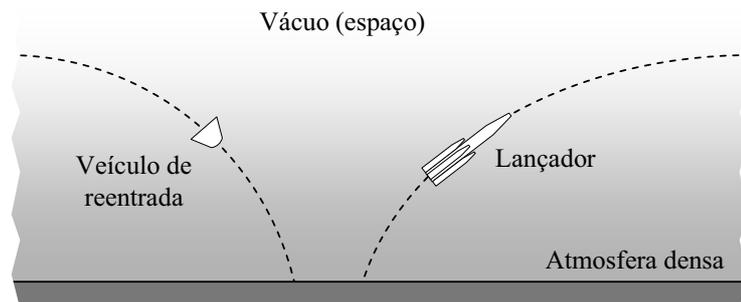


Figura 3: Trajetórias de lançadores e de veículos de reentrada.

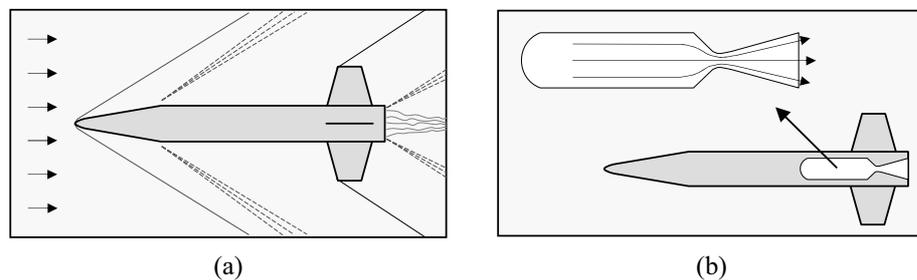


Figura 4: Escoamentos (a) externo e (b) interno.

Entre os vários aspectos tecnológicos e de engenharia envolvidos no projeto de um veículo aeroespacial está a análise de escoamentos, tanto internos como externos ao veículo, como mostra a Figura 4.

A análise do escoamento de gases que ocorre externamente ao veículo exige considerável esforço para ser realizado, visto o grau de complexidade que pode assumir o escoamento em determinadas situações, como no caso do surgimento de sistema de choque-expansão sobre o veículo em vôo supersônico e hipersônico. Tal análise é importante do ponto de vista estrutural, para a determinação das cargas que atuam no veículo, do ponto de vista de desempenho e controle, para determinação de coeficientes aerodinâmicos utilizados em análise de trajetórias (dinâmica de vôo), e também do ponto de vista de integridade material devido ao aquecimento cinético quando em vôo supersônico e, principalmente, hipersônico, onde a velocidade do veículo é significativamente superior à velocidade do som na atmosfera local [6]. A Figura 5 ilustra tais problemas de engenharia.

Escoamentos internos estão associados basicamente ao escoamento no interior de sistemas propulsivos, quer seja nos motores-foguete dos lançadores, quer seja nos pequenos propulsores para controle de atitude de espaçonaves e satélites. Calcular com precisão estes escoamentos é importante no sentido de se obter as trações necessárias para o controle adequado dos veículos em vôo atmosférico ou orbital.

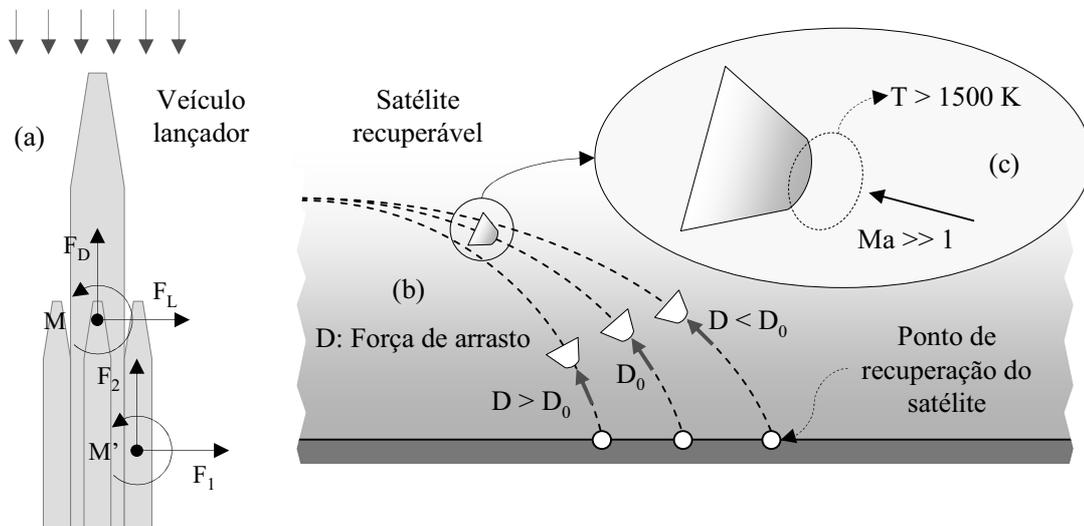


Figura 5: Problemas de engenharia aeroespacial.

(a) Cálculo de cargas estruturais; (b) cálculo de arrasto e trajetografia; (c) determinação de transferência de calor para dimensionamento de proteção térmica.

No caso do cálculo de escoamentos externos existem alguns aspectos associados ao meio em que os veículos aeroespaciais se deslocam. Na baixa atmosfera, mais densa, o ar pode ser considerado como se comportando como um meio contínuo pois, apesar de ser

composto de partículas (moléculas de nitrogênio e oxigênio, principalmente), as escalas existentes no gás, definidas pela distância média entre colisões sucessivas de uma molécula, são muito menores que as escalas do veículo, definidas por uma dimensão típica ou característica deste, como comprimento ou diâmetro. Ou seja, a existência de partículas não é perceptível, e o tratamento matemático baseado na mecânica dos fluidos “tradicional” permite calcular estes escoamentos, existindo um ferramental de cálculo bastante vasto para isso [8, 9, 10].

Entretanto, à medida em que a altitude aumenta, o gás se torna menos denso, ou rarefeito, e a distância média entre colisões sucessivas das partículas constituintes do gás também cresce, tornando-se da ordem de grandeza das dimensões do veículo. Nesta situação, o ferramental de cálculo existente para escoamentos onde o fluido é considerado contínuo se torna inadequado, pois o fluido toma características discretas ou descontínuas, ou seja, a presença de partículas individuais se faz perceber. Assim sendo, um ferramental matemático apropriado para tratar este tipo de escoamento é necessário, especialmente para análise das fases finais de voo de lançadores, e das fases iniciais da reentrada de veículos espaciais [11]. A disciplina que fornece o ferramental necessário para analisar o escoamento em meio rarefeito é a Dinâmica de Gases Rarefeitos [12, 13, 14, 15].

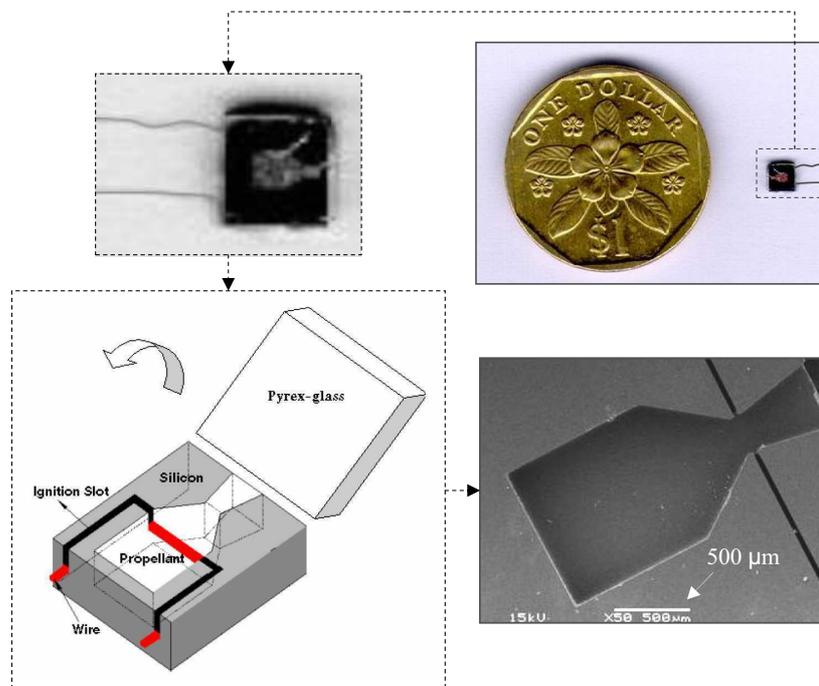


Figura 6: Micro-propulsor.

(Fonte: ref.[16].)

Também nos escoamentos internos fenômeno semelhante ao da rarefação em escoamen-

tos externos ocorre. Neste caso tal fenômeno está associado não à rarefação propriamente dita do gás, mas à diminuição significativa das dimensões do dispositivo propulsor [16], conforme ilustra a Figura 6. Novamente os métodos derivados na Dinâmica de Gases Rarefeitos se tornam necessários para cálculo dos escoamentos. A demanda por micro-propulsores surgiu com o desenvolvimento das micro-espçonaves, como os micro e nano-satélites [17, 18]. Para controle de atitude de tais veículos o sistema propulsivo pode ser bastante diminuto, sendo dimensões típicas dos bocais de saída destes sistemas ilustrados na Figura 7.

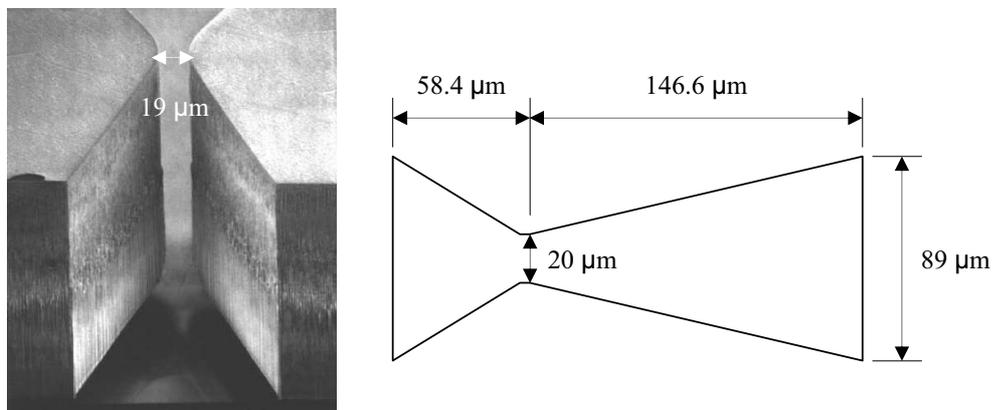


Figura 7: Dimensões típicas de um micro-bocal convergente-divergente.
(Fonte: ref.[18].)

Da breve discussão apresentada acima é possível identificar uma área de pesquisa que apresenta desafios interessantes e promissores, que é a Dinâmica de Gases Rarefeitos. Além da sua utilidade no “mundo macro” da engenharia aeroespacial, existe um bom caminho a percorrer também na direção do “mundo micro e nano”. Assim, na próxima seção essa disciplina é abordada com pouco mais de detalhe para elucidar sua natureza e aplicabilidade.

1.2 Dinâmica de Gases Rarefeitos

1.2.1 Visão Geral

Uma das principais hipóteses envolvidas na formulação matemática da mecânica dos fluidos é a consideração do fluido como sendo um meio contínuo [19]. Isto significa que o livre caminho médio (LCM) entre as moléculas que compõem o fluido é muito menor do que qualquer dimensão que caracteriza a região considerada do escoamento, de tal

forma que qualquer descontinuidade nas propriedades analisadas deixa de ser observável. Sob este ponto de vista, podemos dizer que os escoamentos são tratados como sendo fenômenos macroscópicos. Sobre esta hipótese, equações da mecânica dos fluidos como as de Euler e, posteriormente, as equações de Navier-Stokes, tiveram suas bases de aplicação estabelecidas. Tais equações permitem descrever de forma completa um vasto número de classes de escoamentos de fluidos.

Do ponto de vista matemático, a “hipótese do contínuo” também está associada à continuidade das diversas funções que descrevem o escoamento (no caso, “funções macroscópicas”, como velocidade, densidade³ ou temperatura), o que permite que elas sejam diferenciáveis. Por exemplo, a equação de Euler, utilizada para cálculo de escoamentos na ausência de efeitos da viscosidade [19], é dada por

$$\mathbf{a} = \mathbf{f} - \frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (1.1)$$

onde \mathbf{a} é a aceleração da partícula fluida, \mathbf{f} é a força de campo atuando sobre a partícula fluida (geralmente devido à gravidade), ρ é a densidade do fluido e p a pressão no escoamento. O operador gradiente, ∇ , na forma cartesiana (versores \mathbf{i} , \mathbf{j} e \mathbf{k}), é dado por

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.2)$$

Para que a diferenciação parcial nas três direções indicadas seja possível, é necessário haver a continuidade da função que está sendo diferenciada, que no caso da equação de Euler é a pressão. Assim sendo, a partícula fluida em consideração - o “ponto” na posição (x,y,z) - deve ser contínua, ou seja, conter um número suficiente de moléculas de tal forma que a função pressão se comporte como se fosse contínua, sem mostrar flutuações (ou “saltos” entre as posições \mathbf{r} e $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$), para as dimensões consideradas no escoamento, de forma que a situação física seja compatível com a situação matemática (a diferenciabilidade). A Figura 8 ilustra tal conceito.

Embora a consideração de continuidade acima seja pertinente, o real limite de aplicabilidade das equações do contínuo está no desacoplamento das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e de energia devido a falha da descrição das quantidades de transporte que relacionam estas equações, as quais deixam de ser válidas à medida que o meio não mais possa ser considerado contínuo. As equações de Navier-

³Neste texto, densidade se referirá sempre à densidade absoluta da substância, ou massa específica, m/V .

Stokes são deduzidas a partir do acoplamento destas equações considerando certas leis para transporte de quantidade de movimento transversal (tensões de cisalhamento) e de transferência de calor baseadas na teoria de Chapman-Enskog [20, 21], que na sua forma mais “comum” simplificam para relações simples, como a lei de viscosidade de Newton (fluidos newtonianos, como água e ar) e a lei condução de calor de Fourier. Entretanto, os coeficientes de transporte baseados em tal teoria perdem sua validade para meio não contínuo, e o conjunto de equações de conservação deixa de ser um “conjunto fechado”, e como consequência as equações de Navier-Stokes deixam de ser aplicáveis nessa condição.

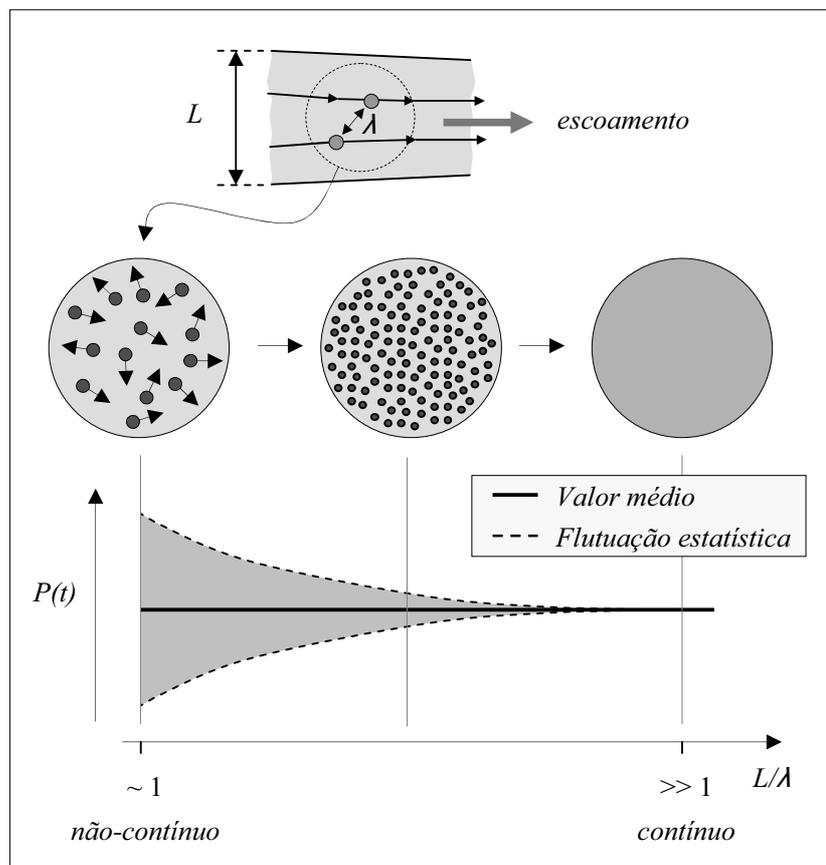


Figura 8: Oscilação estatística da propriedade diminui à medida que o meio se torna contínuo.

Existem situações onde a hipótese de meio contínuo não condiz com a realidade física do fenômeno em estudo. Um dos primeiros a perceber tal situação foi o cientista dinamarquês Martin Knudsen [22], em 1909, ao observar um desvio no valor do fluxo de massa em um tubo quando calculado pela fórmula de Poiseuille para escoamento a baixa pressão. Tal desvio foi explicado pela não mais validade da hipótese de meio contínuo para valores de pressão do gás abaixo de certos valores, situação esta onde o gás é dito

como sendo um gás rarefeito. Assim, na falha da “hipótese do contínuo”, a abordagem matemática do fenômeno físico do escoamento deve levar em conta esse fato, ou seja, deve considerar o fluido como sendo um conjunto de partículas (átomos ou moléculas) que se movem, e tratar de forma adequada tal fenômeno. Esta nova abordagem encontrou suas bases na teoria cinética dos gases, e este trabalho de Knudsen é tido como o evento que iniciou uma nova área de estudo da dinâmica dos gases, a *Dinâmica dos Gases Rarefeitos* (DGR).

A primeira especulação sobre o ar como sendo formado por pequenos corpos foi levantada por Robert Boyle, no século XVII, no seu estudo sobre elasticidade do ar, onde estabeleceu experimentalmente a conhecida lei de Boyle: $pV = cte$ para $T = cte$. Foi Daniel Bernoulli que, no século XVIII, fundou o que é conhecida como a *teoria cinética elementar dos gases*, deduzindo a lei de Boyle e mostrando que a pressão é proporcional ao quadrado da velocidade das moléculas [23]. No século XIX John Herapath [24] especulou que a temperatura de um gás era proporcional à quantidade de movimento de suas moléculas, corrigido mais tarde por J. J. Waterston [25], que mostrou que a temperatura é proporcional à energia das moléculas, e introduziu o teorema de equipartição de energia. Foi Rudolf Clausius [26] que introduziu o conceito de livre caminho médio das moléculas.

A teoria cinética dos gases moderna teve seus primórdios nas idéias lançadas por Maxwell [27], o qual, em 1859, abandonou a percepção de que todas as partículas de um gás se moviam com uma mesma velocidade, e ponderou que deveria haver uma distribuição estatística das velocidades, introduzindo o conceito de *função de distribuição de velocidades*; ele obteve tal distribuição para o estado de equilíbrio de um gás estacionário, e tal distribuição ficou conhecida como *Distribuição Maxwelliana*. Posteriormente, em 1872, Boltzmann [28] obteve a equação cinética, equação esta que permite determinar a evolução da função de distribuição de velocidades em sistemas gasosos fora da condição de equilíbrio. A partir desse ferramental matemático diversos métodos tem sido desenvolvidos para cálculo dos escoamentos ditos rarefeitos.

Não obstante a existência de ambas as classes de escoamento de gases - rarefeitos e não-rarefeitos - até meados do século XX as aplicações que envolviam gases rarefeitos estavam restritas principalmente a escoamentos internos associados a sistemas de vácuo [29]. A partir da década de 1950, com o surgimento da corrida espacial e a necessidade de se analisar o comportamento de veículos se movendo nas camadas mais altas da atmosfera, que são ambientes com alta rarefação, houve um impulso no desenvolvimento de novos métodos para cálculo de escoamentos rarefeitos [11, 30].

A partir da década de 1980 começaram a surgir dispositivos denominados de MEMS (Microelectromechanical systems) e NEMS (Nanoelectromechanical systems), micro e nano-dispositivos [31, 32], dispositivos estes com tamanho da ordem de milímetros e de microns, respectivamente. Tais dispositivos envolvem em muitos casos o escoamento de algum gás em seu interior, e devido às suas dimensões diminutas, não raro o LCM das moléculas e as dimensões características da região de escoamento no dispositivo são de ordens de grandeza próximas entre si, o que já descaracteriza o escoamento de um “fluido contínuo”.

Em suma, o avanço tecnológico tem levado a um desenvolvimento cada vez maior de novas soluções de engenharia onde existe a presença de escoamento de gases rarefeitos, o que tem exigido também, cada vez mais, que os métodos existentes da DGR sejam aprimorados, que novos métodos sejam criados e que códigos computacionais sejam desenvolvidos para atender a essa nova demanda tecnológica. Isto fica mais claro na próxima seção, onde são apresentados exemplos onde os métodos da DGR têm grande utilidade.

1.2.2 Aplicações da Dinâmica dos Gases Rarefeitos

Existem muitas áreas onde os métodos da DGR [12, 17, 21, 33, 34, 35, 36] são aplicáveis. São descritas a seguir várias situações mostrando onde tais métodos são úteis.

Uma área onde os métodos da DGR têm sido amplamente utilizados é na melhoria do processo de fabricação de microprocessadores eletrônicos [37, 38]. Uma das peças chave dos equipamentos utilizados na fabricação destes e de outros dispositivos microeletrônicos é o reator de plasma, usado em cerca de 30% a 40% dos passos da fabricação. O plasma gerado por estes reatores são gases rarefeitos energizados utilizados para remover ou depositar partículas em “wafers” (bolachas) de silício. A possibilidade de simular o escoamento do plasma utilizando algum método da DGR permite aos fabricantes avaliar a viabilidade dos diferentes projetos de reatores antes destes serem implementados, e também otimizar reatores já existentes.

Outro problema bem estudado envolve o cálculo do escoamento em micro-canais, tipo de escoamento comum em MEMS/NEMS e em dispositivos como os discos rígidos de computadores [39, 40]. Neste caso em particular, a cabeça de leitura/gravação “flutua” numa distância menor do que 50 nm acima da superfície do disco, e esta distância é da ordem de grandeza do LCM das moléculas. O cálculo deste tipo de escoamento é crucial para determinar a força devido à pressão sobre a cabeça de gravação de forma a permitir que a distância de leitura/gravação seja adequadamente determinada e controlada, essencial

para boa performance deste dispositivo.

Uma vertente de tecnologia que tem se desenvolvido com intensidade é a tecnologia de laboratórios em chips - “lab on a chip technology” [41, 42]. A mesma tecnologia utilizada na fabricação de MEMS/NEMS tornou possível a construção de micro-analisadores, como sistemas miniaturizados de cromatografia e de espectrografia de massa. Para coleta de amostras de gás para análise, faz-se uso micro-bombas (“Knudsen compressors”) que operam com gás rarefeito.

Outra aplicação crescente está relacionada com a geração de energia a partir de micro-turbinas a gás para dispositivos eletrônicos miniaturizados ou portáteis, cujas dimensões já inspiram cuidados na consideração do gás como contínuo [43, 44, 45, 46].

Na área aeroespacial, existem os micro-sistemas propulsivos utilizados em pequenos veículos espaciais (satélites), e que operam também em condição de escoamento rarefeito através de seus micro-bocais (ou micro-tubeiras) [47], conforme já mencionado anteriormente.

Na Figura 9 são ilustrados alguns dos dispositivos aqui citados e onde é possível haver falha da hipótese de meio contínuo no escoamento, caso onde os métodos da DGR tornam-se necessários.

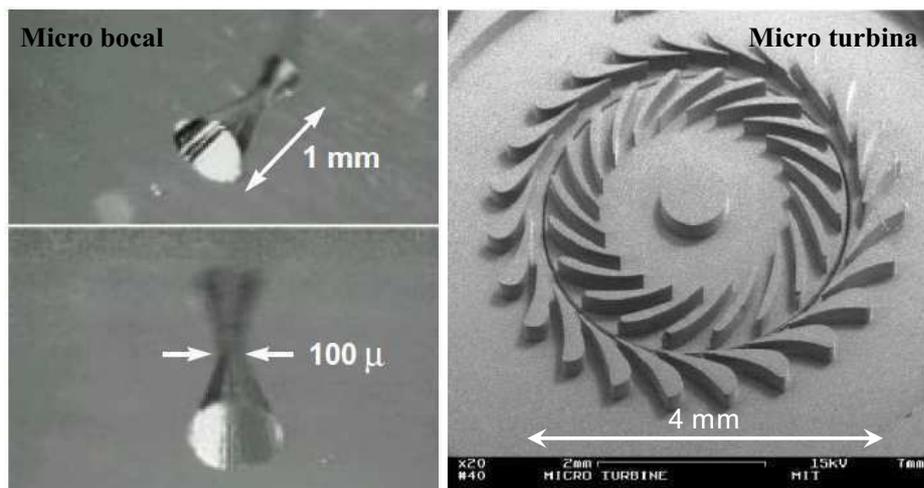


Figura 9: Escoamentos em micro-bocais e micro-turbinas podem ser rarefeitos.
(Fonte: ref.[43].)

Ainda na área aeroespacial, um dos problemas mais frequentes envolve a aerotermodinâmica de satélites recuperáveis [48, 49, 50], onde os métodos da DGR desempenham um papel importante na determinação de parâmetros como o coeficiente de arrasto, necessá-

rio para cálculos de trajetografia, e o coeficiente de transferência de calor, relevante para a determinação de proteções térmicas, especialmente em extremidades de ogivas, onde o aquecimento cinético é muito intenso, conforme sugere a Figura 10.

As aplicações envolvendo sistemas de vácuo são mais antigas, mas não menos importantes [15, 35, 36, 51]. Os problemas analisados são mais relativos a escoamento de gases a baixíssimas pressões em equipamentos de dimensões não tão reduzidas, ao contrário dos micro ou nano-dispositivos, onde a rarefação existe também por decorrência das diminutas dimensões dos dispositivos analisados.

Outros exemplos de aplicações onde os métodos da DGR são úteis: separação de gases, filtros finos que conseguem tirar micropartículas do ar [29], indústria de lasers [52], escoamento de gases através de meios porosos, engenharia química relacionada com gases, secagem, reações [53, 54, 55, 56, 57] e cálculo de escoamentos astrofísicos [58].

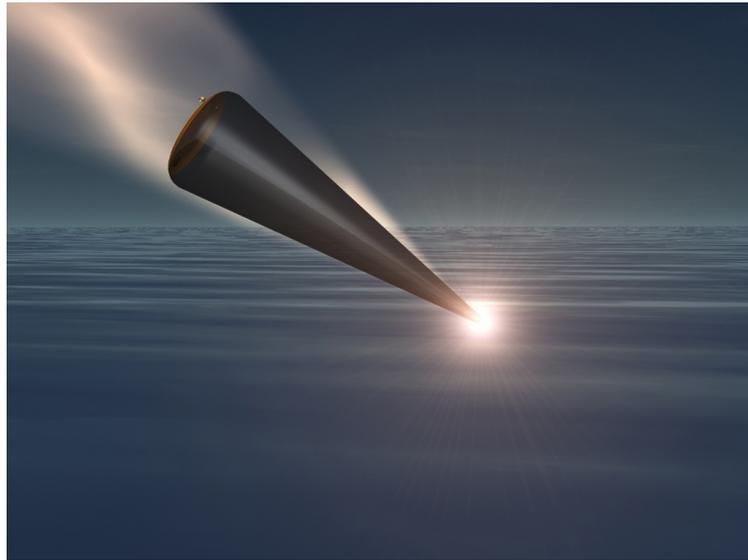


Figura 10: Aquecimento na extremidade da ogiva de veículos de reentrada.
(Fonte: U.S. Air Force official web site - <http://www.af.mil/art/mediagallery.asp?galleryID=97>.)

Dentre os principais problemas relacionados com a dinâmica dos gases rarefeitos, pode-se listar como principais parâmetros a calcular os seguintes:

- *para escoamentos internos:* cálculo da taxa de fluxo de massa através de microcanais [59, 60], cálculo da força de amortecimento de peças móveis, como em mancais de micro turbinas, [44, 45], e a troca de calor através do ar entre peças com temperaturas diferentes [61, 62, 63];

- *para escoamentos externos*: cálculo de forças aerodinâmicas e coeficientes de atrito, pressão e transferência de calor em veículos de reentrada [64] e micro-veículos aéreos [49, 50, 65, 66], dentre outros.

A variedade e a quantidade de problemas cuja solução passa pela utilização dos métodos da DGR evidencia a sua relevância para a engenharia e sua importância para o avanço tecnológico, tornando a DGR uma área cujo estudo e desenvolvimento deve ser incentivado.

1.2.3 Caracterização da Rarefação - Número de Knudsen

Para caracterizar o nível de rarefação de um gás, e poder avaliar a validade ou não da hipótese de meio contínuo, Knudsen propôs um parâmetro que relaciona a dimensão característica de um escoamento, L , com o LCM, λ , mais tarde denominado número de Knudsen [67], Kn , dado por

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}. \quad (1.3)$$

Para escoamentos com geometria mais complexa e sem um comprimento característico bem definido, L é tomado como a magnitude do comprimento de um gradiente macroscópico, ou seja, $L = \phi/|\nabla\phi|$, onde ϕ pode ser densidade, temperatura, pressão ou velocidade.

Assim, dentro das faixas de variação do número de Knudsen, Kn , podem ser caracterizados alguns regimes conforme o nível de rarefação do gás no escoamento, cada qual requerendo uma forma adequada para modelagem e cálculo. Esses regimes são [35, 68, 69]:

- *Regime hidrodinâmico ou contínuo*: $\text{Kn} < 10^{-3}$

Neste regime, a hipótese de meio contínuo é válida, e as equações de Navier-Stokes e Euler podem ser utilizadas com a condição de, junto a um contorno sólido, a velocidade ser nula (aderência, ou não escorregamento) e a temperatura do fluido ser a mesma da do contorno sólido.

- *Regime de escorregamento*: $10^{-3} < \text{Kn} < 10^{-1}$

Neste regime, as equações de Navier-Stokes fornecem uma razoável descrição do escoamento desde que as condições de contorno adequadas, relativas à velocidade tangencial de escorregamento e ao salto de temperatura, sejam implementadas entre o gás e o contorno sólido, pois a condição de aderência total do fluido a um contorno sólido, e a condição da temperatura do fluido ser igual à temperatura deste, já não são mais verdadeiras.

- *Regime de transição*: $10^{-1} < \text{Kn} < 10$

Neste regime, a hipótese do contínuo começa a falhar, e o uso da equação de Navier-Stokes ou de Euler se torna inadequado. Métodos alternativos para descrever o escoamento são necessários, como as abordagens propostas por Grad ("moment method") ou Burnett (equações derivadas da equação de Boltzmann a partir da expansão de Chapman-Enskog de ordem superior) [21], aplicáveis nas proximidades do regime hidrodinâmico, a solução das equações cinéticas (derivadas a partir da simplificação do termo colisional da equação de Boltzmann) [35], e a abordagem baseada em simulação direta de colisões de partículas (DSMC - Direct Simulation Monte Carlo) [68]. Estas duas últimas abordagens são aplicáveis a todo intervalo do regime de transição.

- *Regime de moléculas livres*: $10 < \text{Kn}$

Neste regime, considera-se que não há mais colisões entre as partículas (átomos ou moléculas), e a interação destas se dá apenas com os contornos sólidos. Neste caso, a solução da equação de Boltzmann sem o termo colisional ("Clausing's equation") ou o método DSMC (que também modela as colisões com as fronteiras, além das colisões com as partículas) são adequados para uso neste regime [35].

A diferença qualitativa de um escoamento onde a hipótese do contínuo começa a falhar pode ser visualizada na Figura 11: o comportamento dos escoamentos de Couette e Poiseuille são mostrados para o regime de escorregamento ("slip flow") citado acima, bem como o significado do salto de temperatura é ilustrado.

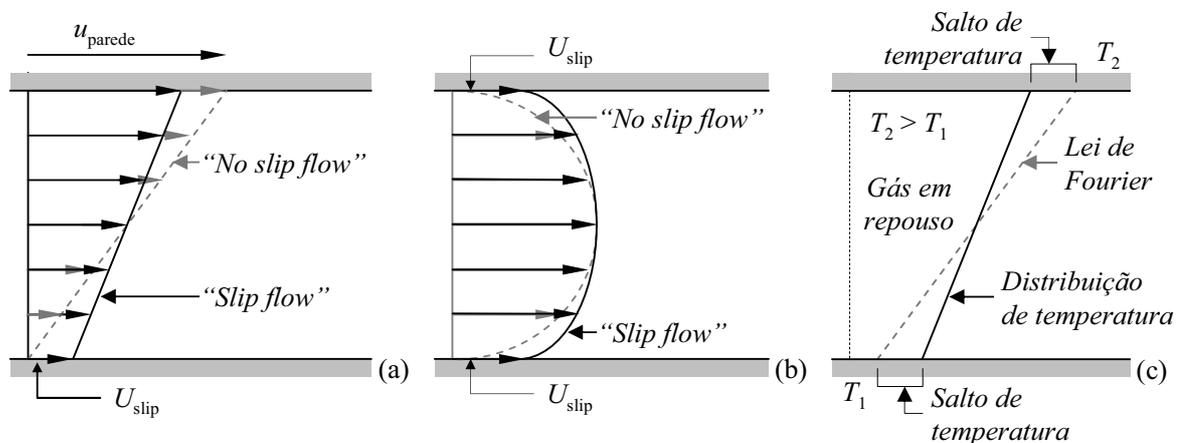


Figura 11: Escoamento de Couette (a) e de Poiseuille (b) com escorregamento; (c) salto de temperatura.

O conhecimento do valor do número de Knudsen permite também avaliar qual formulação matemática é a mais adequada para análise do escoamento de gás em questão, conforme ilustra a Figura 12.

No caso de micro e nano-sistemas, como alguns MEMS/NEMS, as dimensões podem ser da ordem de alguns microns, às vezes nanômetros. Em condições normais o LCM das moléculas do ar possui a ordem de 100 nm e, conseqüentemente, o número de Knudsen pode ser da ordem de 1 ou maior, de modo que os problemas relacionados com estes micro sistemas devem ser resolvidos no nível da função de distribuição das velocidades moleculares (conceitos de Maxwell e Boltzmann [27, 28]), com o respectivo uso dos métodos da DGR. As equações da mecânica dos meios contínuos não são válidas no regime em que se encontram esses micro sistemas e, se utilizadas, não fornecem resultados coerentes com a prática.

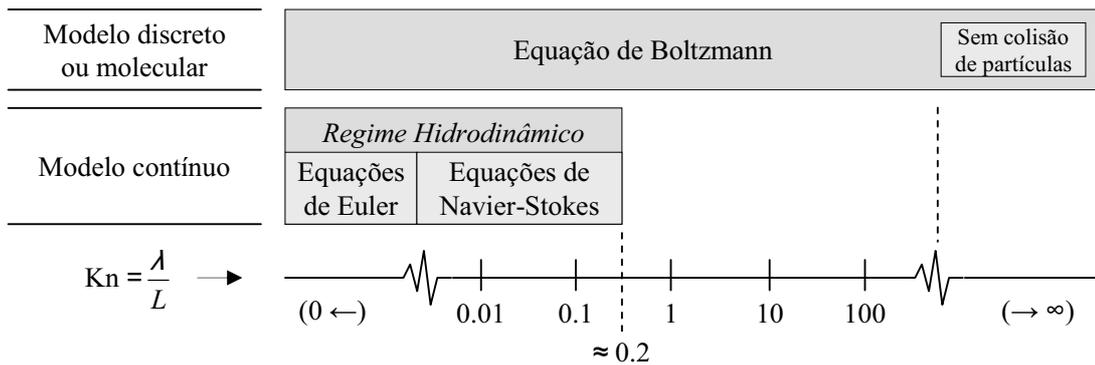


Figura 12: Variação do número de Knudsen e modelos matemáticos adequados (Adaptado da ref.[68].)

1.3 Proposta deste Trabalho

1.3.1 Considerações Gerais

Pelo exposto até o momento é possível perceber que os métodos da DGR têm um espaço importante de aplicabilidade na engenharia aeroespacial, não só no cálculo de escoamentos externos a veículos lançadores e de reentrada, como também em escoamentos internos devido à tendência crescente de miniaturização dos dispositivos aeroespaciais, em particular dos dispositivos propulsores. Assim, optou-se por explorar a aplicabilidade da DGR justamente nessas duas classes de escoamento através da escolha de problemas onde resultados na literatura são escassos, ou inexistentes. Para cálculo desses escoamentos é

utilizada a Simulação Direta de Monte Carlo, mais conhecida pela sigla DSMC (Direct Simulation Monte Carlo), introduzida por G.A.Bird [68].

1.3.2 Micro-sistemas Propulsivos - Fendas

O escoamento através de fendas, que é interno, é o tipo de escoamento que pode ocorrer em alguns MEMS/NEMS, em micro-turbinas, micro-bombas, em equipamentos de vácuo e, em particular, em micro e nano-dispositivos propulsivos espaciais. Neste trabalho é analisado o escoamento de um gás através de uma fenda que separa dois reservatórios com diferentes pressões, conforme ilustra a Figura 13.

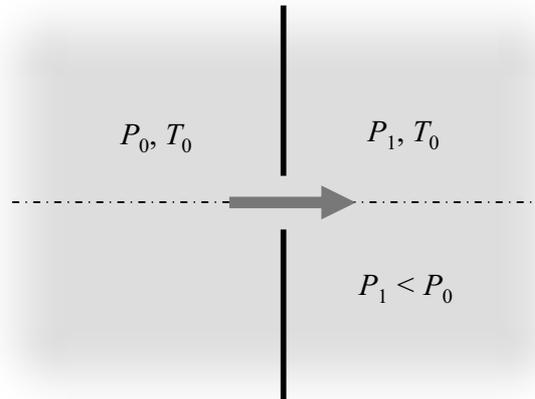


Figura 13: Modelo físico do escoamento através de uma fenda.

Quando existe escoamento da fenda para a atmosfera livre altamente rarefeita, é de interesse a análise do escoamento após a saída para prever a interação com eventuais obstáculos, como pode ocorrer, por exemplo, em jatos de propulsores em veículos espaciais. Bancos de ensaio de tração de micro-propulsores, que podem medir trações da ordem de $1 \mu\text{N}$, necessitam de resultados de simulações numéricas e soluções analíticas para poderem ser calibrados [70]. A determinação do fluxo de massa através da fenda, correspondente à “garganta” de um bocal convergente-divergente bidimensional, é útil para cálculo da tração fornecida pelo micro-dispositivo propulsor [71].

Todo o intervalo do número de Knudsen ($0 < \text{Kn} < \infty$) é considerado no cálculo desse escoamento. Embora o escoamento através de fendas (“slit flow”) seja um problema cujos resultados têm boa aplicabilidade, poucos trabalhos existem versando sobre a solução deste problema, ou de problemas similares, como o escoamento através de orifícios

[72, 73, 74]. Sob este ponto de vista, uma investigação dos resultados de cálculo deste escoamento em particular, realizado através do método numérico aqui proposto (DSMC), é interessante no sentido de estabelecer bases metodológicas mais sólidas para aplicação no cálculo de escoamentos onde a geometria é mais complexa, como nos mini e micro-bocais dos dispositivos propulsores miniaturizados.

O ponto de partida deste estudo é o trabalho realizado por Sharipov [75] para escoamentos através de orifícios.

1.3.3 Projeto SARA - Aerodinâmica de Satélite

O segundo estudo realizado neste trabalho se refere à aerodinâmica do satélite brasileiro SARA (SATéelite de Reentrada Atmosférica), mostrado na Figura 14. O projeto SARA está sendo desenvolvido pelo Instituto de Aeronáutica e Espaço-IAE, sediado em São José dos Campos, São Paulo, e compreende o desenvolvimento de uma plataforma espacial para experimentos em ambiente de microgravidade destinada a operar em órbita baixa, circular, a 300 km de altitude, por um período máximo de dez dias. Assim sendo, é necessário conhecer em que condições se dará o retorno desse veículo através da atmosfera para se poder prever sua trajetória (para recuperação) e os requisitos de proteção térmica, uma vez que o aquecimento cinético é intenso durante a reentrada.

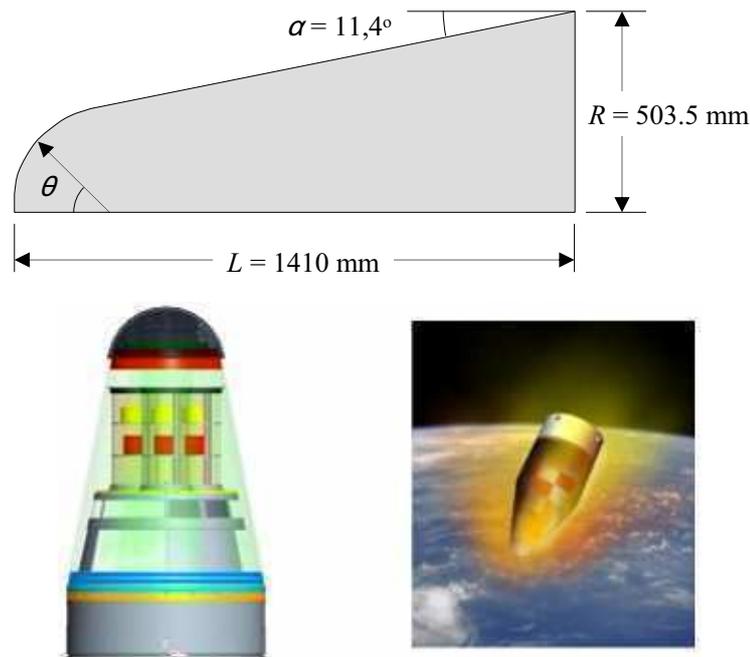


Figura 14: Satélite SARA.

(Fonte: site oficial do Instituto de Aeronáutica e Espaço - www.iae.cta.br.)

Já existem estudos para o SARA considerando o escoamento de gás monoatômico, vide Sharipov [50, 76, 77], mas surgiu a necessidade por parte do IAE, durante o trabalho de pesquisa desta tese, de desenvolver estudo similar considerando o gás como sendo diatômico com o intuito de verificar eventuais discrepâncias nos parâmetros aerodinâmicos (coeficientes de arrasto, pressão, atrito e de transferência de calor) com esta nova consideração. No caso de gases monoatômicos, ideais, a interação existente na colisão entre as partículas considera basicamente apenas a troca de energia translacional. Para gases poliatômicos, a energia rotacional, e mesmo a vibracional, pode ter uma participação mais importante na interação entre as moléculas durante a colisão (efeito a curta distância). Para gases diatômicos, como será visto mais adiante neste trabalho, é possível considerar, num primeiro momento, apenas as energias translacional e rotacional no cálculo da interação molecular. Assim sendo, neste estudo a aerodinâmica do satélite é abordada considerando o gás diatômico nitrogênio, N_2 , principal constituinte da atmosfera.

1.4 Revisão de Literatura

1.4.1 Escoamento através de Orifícios e Fendas

Na literatura existem duas classes de escoamento que são semelhantes entre si no que tange à abordagem de solução usada neste trabalho, que são os escoamentos através de orifícios e o através de fendas, sendo este último assunto específico desta tese. Assim sendo, a revisão de literatura será centrada nestes dois tipos de escoamento.

1.4.1.1 Orifícios

O escoamento através de pequenos orifícios tem grande interesse prático. Este tipo de escoamento acontece em diversos tipos de situações, das quais pode-se citar:

- equipamentos geradores de vácuo (Sharipov [36], Dushman [78] e Roth [79]);
- em micro fluidodinâmica (Sharipov [17] e Aktas, Aluru & Ravaiolo [80]);
- microscopia eletrônica (Danilatos [81] & Danilatos, Phillips e Nailo [82]);
- projeto de veículos espaciais (Jamison, Ketsdever e Muntz [70]);
- metrologia de escoamento de gases (Szwemin, Szymanski e Jousten [83], Jitschin, Weber e Hartmann [84] e Jitschin, Ronzheimer e Khodabakhshi [85]).

Como observado nos trabalhos de Sharipov e Seleznev [35] e Sharipov [74], apesar do grande interesse prático, até o momento nenhum resultado confiável para escoamento através de orifícios foi disponibilizado na literatura para faixas amplas dos parâmetros que determinam o escoamento dos gases, que são o parâmetro de rarefação⁴ e a queda de pressão através do orifício.

Para escoamento através de orifícios, é comum identificar três regimes quanto a rarefação do gás. Se a rarefação do gás é alta, com o LCM no reservatório à montante significativamente maior que o raio do orifício, o regime é não colisional, ou de moléculas livres. Se a rarefação é pequena, com o LCM bem menor que o raio do orifício, tem-se o regime hidrodinâmico. Entre estes dois regimes está o regime de transição (onde se inclui a faixa do “slip flow”).

Quanto à queda de pressão, duas situações são geralmente consideradas. Primeiro, a pressão no reservatório à jusante sendo desprezível em relação ao reservatório à montante, dizendo-se que o gás está escoando para o vácuo. A outra situação corresponde à uma queda de pressão significativamente menor que a pressão média entre os reservatórios. Praticamente inexistem resultados para razões de pressão intermediárias.

Alguns trabalhos, como os de Liepmann [86], Narasimha [87], Willis [88], Rotenberg e Weitzner [89], apresentaram propostas de expressões analíticas para o fluxo de massa perto do regime de moléculas livres no caso de escoamento para o vácuo, o que é válido para uma faixa estreita de rarefação do gás. Alguns resultados numéricos para escoamento para vácuo no regime de transição foram reportados por Sharipov [74] e Shakhov [90]. No regime hidrodinâmico o problema foi resolvido por Arder [91] baseando-se na equação de Euler, que é válida para valores do número de Reynolds elevados. Para números de Reynolds baixos, Hasimoto [91] e Roscoe [92] resolveram a equação de Stokes analiticamente. Assim, os resultados teóricos para escoamento através de orifícios estão restritos a pequenas faixas de rarefação do gás e queda de pressão. Visando obter resultados numa faixa ampla de rarefação e queda de pressão, Sharipov [75] apresentou resultados teóricos para escoamento de gás rarefeito através de orifícios para vários valores do número de Knudsen e para queda de pressão utilizando a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC-Direct Simulation Monte Carlo).

⁴O parâmetro de rarefação é proporcional ao inverso do número de Knudsen. É definido mais adiante neste trabalho.

Resultados experimentais sistemáticos sobre escoamento de orifícios no regime hidrodinâmico foram reportados por Perry [93] para quedas de pressão elevadas, e por Linden e Othmer [94] para pequenas quedas de pressão. Alguns resultados para o caso de escoamento para vácuo foram apresentados por Liepmann [86]; entretanto, a variação dos dados experimentais no regime de transição é grande, tornando estes resultados não confiáveis. Sreekanth [95] apresentou dados experimentais no regime de transição para vários valores de queda de pressão. Borisov et al. [73] e Porodnov et al. [96] obtiveram resultados experimentais para pequenas quedas de pressão numa faixa ampla de rarefação de gás. Barashkin, Porodnov e Chemagin [97], Barashkin, Porodnov e Suetin [98] e Jitschin et al. [85] apresentaram dados experimentais de escoamentos para o vácuo através de um orifício praticamente cobrindo toda a faixa de rarefação de gás. Fujimoto e Usami [99] reportaram dados experimentais para fluxo de massa através de tubos curtos. A razão comprimento/raio do tubo mais curto foi $L/a=0.05$, que pode ser considerado um orifício. Nesse último trabalho foram medidos o fluxo de massa para um faixa ampla de rarefação do gás para vários valores de queda de pressão.

Como visto acima, resultados experimentais na literatura para escoamento através de orifícios não são tantos como seria de se esperar, o que requer ainda algum trabalho para se compreender melhor este tipo de escoamento, conceitualmente semelhante ao escoamento através de fendas.

1.4.1.2 Fendas

Este tipo de escoamento tem aplicações semelhantes ao do escoamento através de orifícios. Particularmente escoamentos no interior de certos MEMS/NEMS, e também em micro-dispositivos propulsivos, podem fazer uso dos resultados deste tipo de escoamento.

Comparando com o escoamento através de orifícios, existem menos resultados disponíveis na literatura para o escoamento através de fendas. Willis [88] calculou o fluxo de massa através de fendas para número de Knudsen elevados utilizando uma forma integral da equação cinética. Stewart [100] analisou o fluxo de massa na região do escoamento de moléculas livres para várias relações de pressão entre os reservatórios utilizando o modelo BGK (modelo cinético de Bhatnagar, Gross and Krook [101]) na solução da equação cinética. Hasegawa e Sone [102], utilizando equações cinéticas na forma integral (equação linearizada de Boltzmann-Krook-Welander), analisaram o escoamento através de fendas entre reservatórios com pequenas diferenças de pressão, obtendo os campos de velocidade, densidade e temperatura, bem como o fluxo de massa através da fenda. Wadsworth e Er-

win [103] e Chung et al. [104] obtiveram resultados admitindo simetria do escoamento em relação ao plano perpendicular à fenda em seu ponto médio, utilizando a técnica DSMC e a solução da equação cinética, também obtendo informações relativas a fluxo de massa e os campos de velocidade, densidade e temperatura. Sharipov [105, 106, 107] desenvolveu alguns trabalhos analisando o escoamento através de fendas fazendo uso da solução da equação cinética (modelo BGK, e modelo S proposto por Shakhov [108]) para pequenas quedas de pressão.

Recentemente surgiram trabalhos de Sazhin [109, 110] sobre escoamento através de fendas quase que concomitantemente com resultados publicados por Sharipov e Kozak [111]. A técnica utilizada nos dois trabalhos é a mesma (Simulação Direta de Monte Carlo - DSMC - descrita no próximo capítulo), porém existem diferenças na forma em como o domínio do escoamento é discretizado. Não obstante, é uma fonte de verificação de resultados, uma vez que estes são escassos na literatura.

Entretanto, o trabalho de Sazhin citado acima, embora cobrindo o amplo espectro de rarefação, considera apenas escoamento para o vácuo. Não existem disponíveis na literatura resultados para escoamentos através de fendas cobrindo todo o intervalo de rarefação e várias razões de pressão conforme obtidos no presente trabalho.

1.4.2 Aerotermodinâmica de Satélite na Reentrada

Para realizar o projeto de um satélite retornável, três problemas relacionados com o escoamento de um gás rarefeito devem ser resolvidos. Um deles é calcular a influência das camadas superiores da atmosfera na dinâmica de vôo do satélite quando ele está em órbita baixa. Apesar da força de arrasto nesta altitude ser muito pequena, ela pode mudar significativamente a órbita do satélite durante um vôo prolongado. O segundo problema é calcular o corredor de reentrada, isto é, calcular a trajetória da queda do satélite na superfície da Terra. Para resolver este problema é necessário conhecer a força de arrasto em função da altitude e da velocidade do satélite. O terceiro problema é criar uma proteção térmica para o satélite. Para resolver este problema é necessário conhecer o fluxo de calor na superfície do satélite durante a queda. O conjunto destes problemas denomina-se aerotermodinâmica de reentrada ou do satélite [112, 113, 114].

Os primeiros esforços para cálculo de escoamentos rarefeitos durante a reentrada de veículos espaciais envolveram métodos analíticos considerando os resultados da teoria cinética dos gases, como a função de distribuição de velocidades de Maxwell, conforme os trabalhos de Shaff & Chambré [11] e de Schaff & Talbot [30]. Posteriormente, a utilização

dos conceitos da cinética dos gases na aerodinâmica foi incrementada, conforme apontado por Kogan [48]. Métodos baseados na solução da equação cinética de Boltzmann tem sido utilizados, como nos trabalhos mais recentes de Li e Zhang [64], e Xu et al [115], e também a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC), como nos trabalhos de Sharipov [50], LeBeu e Lumpkin III [116] e Santos [117, 118].

Salas [119] deixa claro em sua revisão das atividades de aerodinâmica dentro do programa de atividades aeronáuticas fundamentais da NASA que o método DSMC é a principal ferramenta disponível para simulação no regime não-contínuo para configurações complexas de escoamento em alta velocidade. Dessa forma, o aprimoramento e desenvolvimento de códigos computacionais baseados na técnica DSMC para resolver o problema de aerodinâmica, conforme proposto neste trabalho, vai de encontro com as necessidades mais atuais da engenharia aeroespacial.

Para a configuração geométrica específica do satélite SARA, analisada neste trabalho, ou para configurações semelhantes, não foram identificados na literatura resultados de cálculo para os parâmetros aqui citados como função do número de Mach e do parâmetro de rarefação (este último variando numa ampla faixa) considerando o escoamento de um gás diatômico.

1.5 Organização da Tese

O restante deste trabalho é dividido nos capítulos descritos abaixo.

- **Capítulo 2 *Metodologia de Cálculo*.** Neste capítulo o conceito de função de distribuição de velocidades, essencial no estudo dos gases rarefeitos, é apresentado. A equação que permite analisar a evolução desta função no espaço e no tempo, a Equação de Boltzmann, é descrita e os métodos utilizados na sua solução são abordados de forma geral. O método utilizado neste trabalho, que é a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC), é explicado com mais detalhes.
- **Capítulo 3 *Escoamento através de Fenda*.** Este capítulo apresenta e discute os resultados do cálculo do escoamento através de uma fenda, que é um escoamento interno. O gás é considerado monoatômico e o fluxo de massa adimensional é calculado para vários níveis de rarefação e razões de pressão. Visualizações dos campos de densidade e temperatura, bem como das linhas de corrente, são apresentadas. Uma fórmula de interpolação para o fluxo de massa adimensional através da fenda

é proposta, ficando disponível para uso em escoamentos com geometria similar.

- **Capítulo 4 *Aerodinâmica de Satélite*.** Este capítulo apresenta e discute os resultados para o cálculo aerodinâmico do satélite SARA considerando o gás como diatômico. O coeficiente de arrasto é calculado para vários níveis de rarefação do gás e para dois valores de número de Mach. Também os coeficientes de pressão, atrito e transferência de energia são calculados, e as visualizações dos campos de densidade, temperatura e número de Mach local, bem como das linhas de corrente, são apresentadas. Estes resultados são úteis para análise da proteção térmica do veículo. Uma fórmula de interpolação para o coeficiente de arrasto é proposta, a qual pode ser utilizada para cálculos de trajetória de reentrada do satélite.
- **Capítulo 5 *Conclusão*.** Neste último capítulo um resumo geral sobre o que foi realizado nesta tese é apresentado, com comentários sobre a motivação do trabalho, sobre os resultados obtidos, as dificuldades encontradas e os próximos passos possíveis na pesquisa e desenvolvimento dos métodos da DGR e suas aplicações na engenharia aeroespacial, particularmente usando a técnica DSMC.

1.6 Contribuição da Tese

Além da análise qualitativa dos escoamentos rarefeitos estudados neste trabalho, para cada um deles são disponibilizadas expressões que permitem ao leitor aplicá-las na solução de problemas de engenharia.

Para o primeiro escoamento estudado foi obtida uma expressão para cálculo do fluxo de massa adimensional, W , através de uma fenda, expressão (3.14) (pág. 110), para várias razões de pressão entre os reservatórios ($p_1/p_0 \leq 0.7$) e vários níveis de rarefação. Na literatura não existe nenhum resultado desse tipo. Tal resultado pode ser utilizado para cálculo do fluxo de massa em escoamentos com geometria semelhante ou, por exemplo, auxiliar no processo de calibração de bancos de ensaio de micro-propulsores com simetria plana.

Para o segundo estudo, o escoamento em torno do Satélite SARA, além das análises dos diversos coeficientes aerodinâmicos e do campo de escoamento, foi obtida uma expressão que permite o cálculo do coeficiente de arrasto, C_D , para várias condições de voo hipersônico. Esta expressão foi colocada em função de um parâmetro utilizado na engenharia aeroespacial: o número de Reynolds. É a expressão (4.29) (pág. 139), para a qual não se identificou disponível na literatura nenhuma expressão do mesmo tipo. Com

esta expressão, análises de trajetografia e o cálculo de ponto de impacto do satélite visando sua recuperação se tornam possíveis.

2 *Metodologia de Cálculo*

Neste capítulo o conceito de função de distribuição de velocidades, essencial no estudo dos gases rarefeitos, é apresentado. A equação que permite analisar a evolução desta função no espaço e no tempo, a Equação de Boltzmann, é descrita e os métodos utilizados na sua solução são abordados de forma geral. O método utilizado neste trabalho, que é a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC), é explicado com mais detalhes.

2.1 Função de Distribuição de Probabilidade

2.1.1 Visão Geral

Define-se uma variável aleatória x como aquela que pode assumir um valor x_i com determinada probabilidade $P(x_i)$ dentro de um conjunto de valores possíveis. Por exemplo, se x define o valor da face de um dado quando este é jogado, então $x_i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e $P(x_i) = 1/6$, $i = 1, \dots, 6$. Neste caso a variável x é uma variável aleatória discreta, pois assume um número finito de valores. Além disso, $P(x < 1) = 0$, $P(6 < x) = 0$ e $\sum_{i=1}^6 P(x_i) = 1$, que caracteriza o que se denomina função de distribuição de probabilidade da variável x : $P(x) = 1/6$, $1 \leq x \leq 6$, x inteiro.

Uma variável aleatória pode ser contínua (como o volume de chuvas que cai em determinado mês), e neste caso define-se a função de distribuição (ou densidade) de probabilidade, $f(x)$, contínua, de tal forma que a probabilidade $P(x)$ do valor da variável estar entre x e $x + dx$ é $f(x)dx$, ou $P(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x)dx$. Para a função $f(x)$ deve ser observado que

$$f(x) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1. \quad (2.1)$$

A Figura 15 mostra exemplos deste tipo de função.

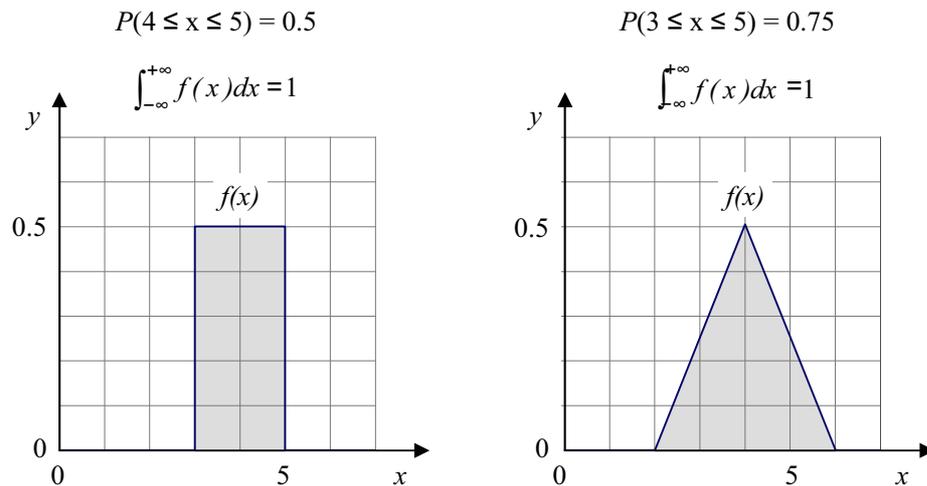


Figura 15: Exemplos de função de distribuição de probabilidade.

Em muitos fenômenos o comportamento das variáveis que os descrevem é definido através de funções de distribuição de probabilidade, sendo uma das mais comuns a função

de distribuição normal, definida na sua forma adimensional ou reduzida como

$$f_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{1}{2}z^2}, \quad z = \frac{x - \mu}{\sigma}, \quad (2.2)$$

onde z é a adimensionalização da variável aleatória x em torno da sua média μ , e σ é o desvio padrão da variável (medida da dispersão dos dados). A forma da função de distribuição normal reduzida pode ser visualizada na Figura 16. Assim, o valor mais provável da variável x é a sua média μ , e quanto mais afastado for o valor escolhido do valor da média, menor a probabilidade desse valor ocorrer.

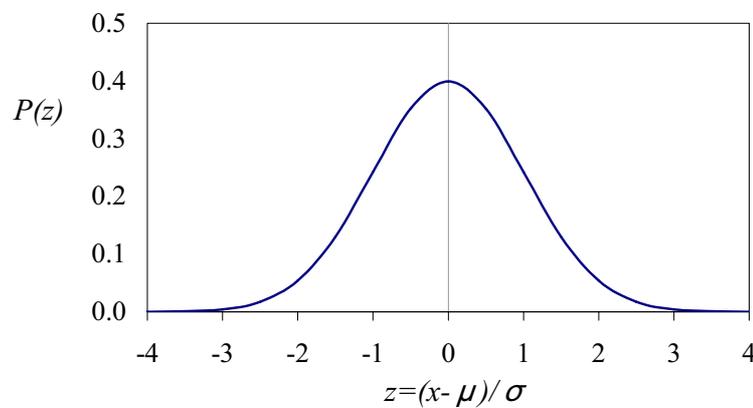


Figura 16: Função de distribuição normal reduzida.

2.1.2 Distribuição Maxwelliana de Velocidades Moleculares

O primeiro cientista a entender um gás do ponto de vista molecular foi Daniel Bernoulli, em 1738, ao descrever a pressão como resultante da mudança de quantidade de movimento dos inúmeros corpúsculos (moléculas) do gás se chocando contra as paredes de um recipiente. Baseado na mecânica Newtoniana, pode-se apenas concluir sobre uma velocidade média de impacto das moléculas, ou melhor, sobre uma energia cinética média.

Embora a consideração de choques elásticos entre as moléculas, e entre moléculas e parede, e o uso da mecânica Newtoniana considerando trajetórias retilíneas pudessem, em princípio, descrever o comportamento do sistema, a quantidade de variáveis envolvidas torna impraticável esta abordagem. Maxwell percebeu isso e passou a ponderar a análise do gás em equilíbrio em termos estatísticos, mais precisamente, em termos de uma função de distribuição de velocidades das moléculas.

Maxwell partiu de três hipóteses principais para desenvolver a sua expressão da função de distribuição de velocidades: (i) que o número de partículas com velocidades entre v_i

e $v_i + dv_i$ é proporcional a dv_i , $i = x, y$ ou z ; (ii) que estes números são independentes entre si e (iii) que não há distinção entre as direções i . Em um gás em equilíbrio, tal distribuição não depende da posição nem do tempo, e Maxwell [120] mostrou que ela é dada pela expressão

$$f^M(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\mathbf{v}^2/v_m^2}, \quad (2.3)$$

onde $f^M(\mathbf{v})$ é a função de distribuição de velocidades de Maxwell, ou simplesmente “distribuição Maxwelliana”, \mathbf{v} é a velocidade da molécula, T é a temperatura do gás, e v_m é o módulo da velocidade mais provável de uma molécula à temperatura T , calculada como

$$v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (2.4)$$

Assim, a expressão $f^M(\mathbf{v})d\mathbf{v}$ fornece a parcela do número total de moléculas, N , na região contendo o gás, que se encontram com o vetor velocidade entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. Sendo uma distribuição de probabilidade, tem-se então que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f^M(\mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = 1. \quad (2.5)$$

O número de partículas com velocidade entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$, dN , é, portanto, dado por

$$dN = N f^M(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (2.6)$$

ou, em termos da densidade numérica n ,

$$dn = n f^M(\mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (2.7)$$

A distribuição dos módulos da velocidade na distribuição de Maxwell, $\varphi^M(v)$, é

$$\varphi^M(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-v^2/v_m^2}. \quad (2.8)$$

A forma da distribuição $\varphi^M(v)$ é ilustrada para o gás nitrogênio na Figura 17. Nesta figura é possível notar a influência da temperatura, e existe também uma dependência da espécie química que compõe o gás, observada na distribuição do gás amônia (NH_3) à 100 K inserida no mesmo gráfico, e que difere da distribuição para o nitrogênio à mesma temperatura (a massa molecular, m , é diferente).

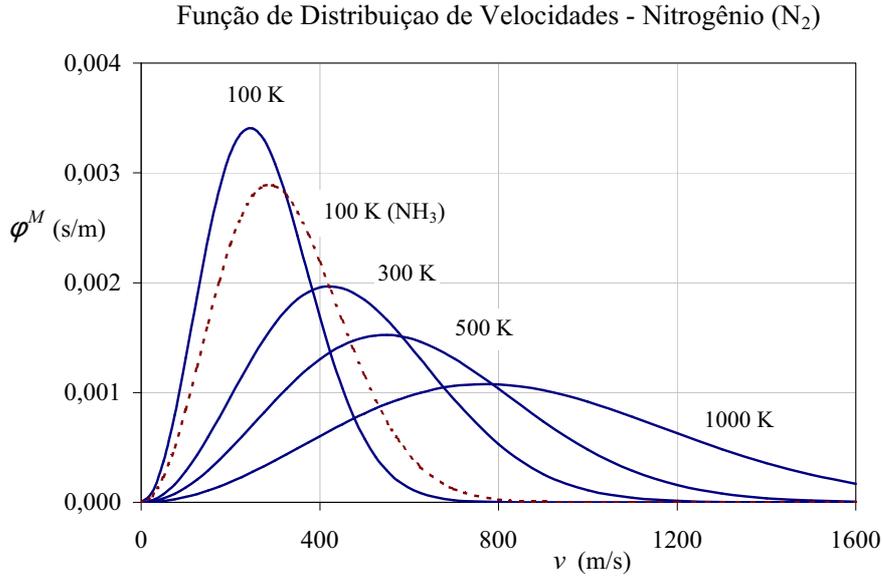


Figura 17: Distribuição de velocidade de Maxwell para nitrogênio obtida a partir da aplicação da equação (2.8).

2.2 A Equação de Boltzmann

2.2.1 Descrição da Equação

A importância da abordagem de Maxwell no estudo dos gases rarefeitos está relacionada ao fato de que sua abordagem parte da consideração de que o fluido é formado por um conjunto de partículas - átomos ou moléculas - e não por um meio tido como contínuo. Entretanto, para viabilizar o uso desta abordagem em cálculos de escoamentos é necessário se determinar a evolução da função de distribuição de velocidades no espaço e no tempo.

Isto foi resolvido com a equação cinética proposta por Boltzmann [28] e a consideração de que a função de distribuição é função também do tempo e do espaço físico, além do espaço de velocidades, ou seja, $f = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$. Assim, a quantidade $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ fornece a parcela de partículas dN no elemento de volume $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ na posição (\mathbf{r}, \mathbf{v}) e no tempo t .

Uma vez conhecida como varia a função $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ na região de escoamento ou, mais precisamente, no espaço de fase (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , ao longo do tempo, as quantidades macroscópicas podem ser obtidas através das expressões [20, 21, 35, 68, 69]

$$n(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{v} \quad (2.9)$$

para a densidade numérica n (número de partículas por unidade de volume),

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (2.10)$$

para a velocidade hidrodinâmica \mathbf{u} ,

$$P_{ij}(t, \mathbf{r}) = m \int V_i V_j f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (2.11)$$

para o tensor de pressões, sendo que

$$p(t, \mathbf{r}) = (1/3) \sum_{i=1}^3 P_{ii}(t, \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

é a pressão p ,

$$T(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{3nk} \int V^2 f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (2.13)$$

para a temperatura T , e

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \frac{m}{2} \int V^2 \mathbf{V} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (2.14)$$

para o vetor fluxo de calor \mathbf{q} , onde \mathbf{V} é a velocidade peculiar, dada por

$$\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}. \quad (2.15)$$

É de interesse identificar os processos que podem levar à alteração do número de partículas no interior de um elemento de espaço de fase, $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$, pois isto permite estabelecer como a função f varia no espaço e no tempo e, como consequência, permite estabelecer o ferramental matemático para analisar escoamentos.

A variação do número de partículas no elemento de espaço de fase $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ é expressa por

$$\frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{r}d\mathbf{v}. \quad (2.16)$$

Seguindo a argumentação de Bird e outros autores [20, 21, 68, 69], são três os processos que ocasionam a alteração do termo dado pela expressão (2.16). Nesta argumentação considera-se o espaço de fase representado por dois elementos separados, o elemento no espaço físico, $d\mathbf{r}$, e o elemento no espaço de velocidades, $d\mathbf{v}$, ressaltando o fato de que as variáveis \mathbf{r} e \mathbf{v} são tratadas como sendo independentes. Assim, \mathbf{v} é considerada como sendo constante dentro de $d\mathbf{r}$, e $d\mathbf{v}$ é considerada como estando localizada no ponto definido por \mathbf{r} . A Figura 18 ilustra este elemento de espaço de fase.

Assim, os três processos para mudança do termo (2.16) são:

- (i) o fluxo líquido de partículas de classe \mathbf{v} (partículas com velocidade entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$) para o interior do elemento do espaço físico, $d\mathbf{r}$;
- (ii) o fluxo líquido de partículas de classe \mathbf{v} para o interior do elemento do espaço de velocidades devido à força externa por unidade de massa, \mathbf{F} ;
- (iii) a inclusão/exclusão de partículas de classe \mathbf{v} no interior do elemento do espaço de velocidades devido às interações moleculares, ou colisões.

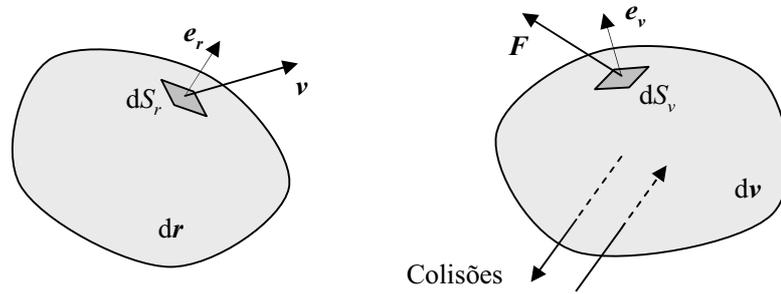


Figura 18: Fluxo molecular através de um elemento $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ do espaço de fase.

O fator (i) envolve fluxo através da superfície do elemento de espaço físico $d\mathbf{r}$, S_r . A quantidade de partículas num elemento de espaço de fase é $f d\mathbf{r}d\mathbf{v}$. Dessa forma, a densidade numérica (número de partículas por volume) no espaço físico $d\mathbf{r}$ é dada por $f d\mathbf{v}$. Assim, o fluxo através de um elemento de área dS_r de partículas de classe \mathbf{v} pode ser calculado como

$$-\int_{S_r} (f d\mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_r dS_r = -\int_{S_r} f \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_r dS_r d\mathbf{v} \quad (2.17)$$

onde, conforme mostra a Figura 18, \mathbf{e}_r é o vetor normal ao elemento de área dS_r .

O teorema de Gauss [19] permite converter a integral de superfície dada pela expressão (2.17) na seguinte integral de volume,

$$-\int_{d\mathbf{r}} \nabla \cdot (f \mathbf{v}) d(d\mathbf{r}) d\mathbf{v}, \quad (2.18)$$

e como f e \mathbf{r} são considerados constantes dentro de $d\mathbf{r}$, segue que o termo (2.18) reduz-se a

$$-\nabla \cdot (f \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}. \quad (2.19)$$

Como apenas partículas de classe \mathbf{v} estão sendo consideradas, \mathbf{v} é constante no espaço físico, e a velocidade pode ser colocada para fora do operador divergente no termo (2.19).

Dessa forma, o fluxo líquido de partículas de classe \mathbf{v} através da superfície do elemento de espaço físico $d\mathbf{r}$ devido à velocidade \mathbf{v} é

$$-\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r} d\mathbf{v}. \quad (2.20)$$

O processo (ii), que ocorre no espaço de velocidades, é análogo ao processo (i) no espaço físico, de modo que a mesma análise realizada acima para o fluxo de partículas para o espaço físico devido à velocidade \mathbf{v} é aplicável para a determinação do fluxo de partículas para o espaço de velocidades devido à força externa por unidade de massa, \mathbf{F} , o que fornece a expressão

$$-\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} d\mathbf{r} d\mathbf{v}. \quad (2.21)$$

O processo (iii), devido às colisões entre moléculas, merece uma análise mais detalhada, o que é feito na próxima seção. Por ora será representado pela expressão

$$Q(ff^*) d\mathbf{r} d\mathbf{v}, \quad (2.22)$$

onde $Q(ff_*)$ é o termo colisional, responsável pelo fluxo líquido de partículas de classe \mathbf{v} para o interior do elemento de espaço de fase devido às colisões intermoleculares, f representa a distribuição de velocidades pré-colisional, e f^* a distribuição de velocidades pós-colisional.

Assim, a soma dos fluxos dados pelas expressões (2.20) e (2.21) com o fluxo devido ao termo colisional, dado pela expressão (2.22), deve ser igual à variação do número de partículas em um elemento de espaço de fase expresso pelo termo (2.16). Assim, é possível escrever, após rearranjo, que

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Q(ff_*). \quad (2.23)$$

A equação (2.23) é a *Equação de Boltzmann*.

2.2.2 Termo Colisional

2.2.2.1 Interação entre Partículas

Para o tratamento do termo colisional é preciso compreender como ocorre a interação entre as partículas do gás. Esta interação ocorre através de forças intermoleculares que são de dois tipos: (i) forças de curto alcance (forças de valência ou químicas), de natureza repulsiva, e (ii) forças de longo alcance (forças de van der Waals), de natureza

atrativa [20, 21, 68].

A força de interação $F_{im}(r)$ e a energia potencial de interação $\varphi(r)$ entre duas partículas esféricas não polares é função da distância intermolecular r , e estão relacionadas através das expressões

$$F_{im}(r) = -\frac{d\varphi}{dr} \quad \text{e} \quad \varphi(r) = \int_r^\infty F_{im}(r)dr. \quad (2.24)$$

Alguns potenciais de interação foram desenvolvidos, sendo os mais comumente usados os seguintes:

- *Potencial de esfera rígida.* Representa somente forças de repulsão entre esferas rígidas de diâmetro a ,

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= \infty & \text{quando } r < a, \\ \varphi(r) &= 0 & \text{quando } r > a. \end{aligned} \quad (2.25)$$

- *Potencial de centro de repulsão.* A função potencial neste modelo tem a forma

$$\varphi(r) = \frac{k}{\eta - 1} r^{-(\eta-1)} \quad (F(r) = kr^{-\eta}), \quad (2.26)$$

que também representa somente forças de repulsão. Quando $\eta = 5$ obtém-se o potencial Maxwelliano, sendo partículas Maxwellianas aquelas que obedecem a este potencial. Tal potencial simplifica a solução da equação de Boltzmann em seu termo colisional eliminando a dependência em relação à velocidade relativa das partículas.

- *Potencial (6-12) de Lennard-Jones.* A função potencial deste modelo fornece uma representação simples e realística para partículas esféricas e não polares através da fórmula

$$\varphi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^6 \right]. \quad (2.27)$$

As formas dos potenciais citados acima, bem como o significado do parâmetro ϵ na equação (2.27), são mostrados na Figura 19. O que se nota é que todos esses potenciais tem alcance limitado, ou seja,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi(r) = 0, \quad (2.28)$$

sendo que, na prática, o alcance da interação é menor do que alguns poucos múltiplos do “raio” da partícula.

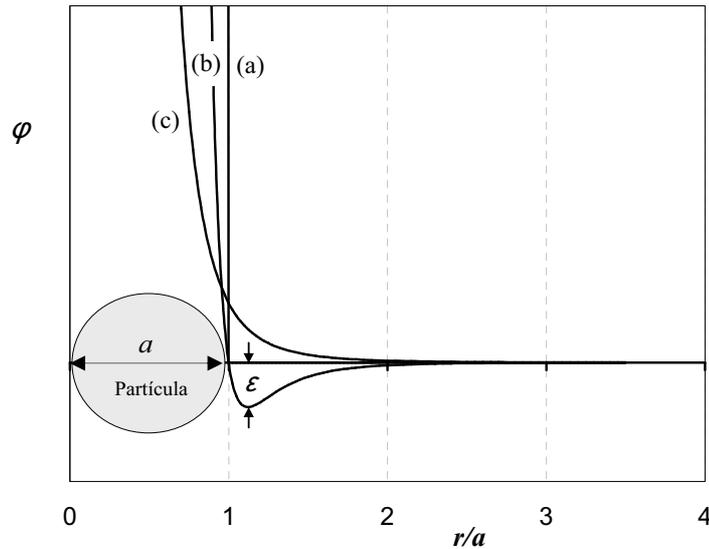


Figura 19: Potenciais de interação.
 (a) Esfera rígida, (b) Lennard-Jones (6-12) e (c) centro de repulsão.

2.2.2.2 Dinâmica das Colisões

O termo colisional expressa a taxa de variação do número de partículas por unidade de tempo e de volume (no espaço de fase), ou seja, a taxa de variação temporal da função de distribuição f no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) no instante t devido às colisões entre partículas. Essa variação tem duas contribuições. A primeira é a subtração de partículas da região neste ponto do espaço de fase que tiveram sua velocidade alterada de \mathbf{v} para \mathbf{v}^* , pós-colisional, devido à colisão com outras partículas com velocidade \mathbf{v}_1 . A segunda é a adição de partículas que tiveram sua velocidade pré-colisional alterada de \mathbf{v}^* para \mathbf{v} devido à colisão com outras partículas com velocidade \mathbf{v}_1^* .

A probabilidade de colisões ternárias ou superiores é muito menor que a da colisão binária em gases rarefeitos, motivo pelo qual não são consideradas [20, 21, 68]. Assim, a dinâmica das colisões binárias envolvendo partículas eletricamente neutras de um gás monoatômico que ocasionam tais mudanças de velocidade estão ilustradas na Figura 20. A colisão direta representa a subtração da partícula do elemento de volume $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , e a colisão inversa introduz a partícula neste elemento. A dinâmica expressa nessa figura se baseia no fato do alcance dos potenciais de interação intermolecular serem limitados (relação (2.28)), o que, junto com a aplicação das equações de conservação de momento linear, momento angular e de energia durante uma colisão binária, permitem escrever que:

- o movimento relativo entre as partículas está confinado em um único plano;

- os módulos das velocidades relativas assintóticas entre as partículas antes e depois da colisão se mantêm, ou seja,

$$v_r = v_r^*, \quad (2.29)$$

onde

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_r^* = \mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}^*; \quad (2.30)$$

- o parâmetro de impacto b , que define a distância entre as trajetórias das partículas antes e depois da colisão, também se mantêm.

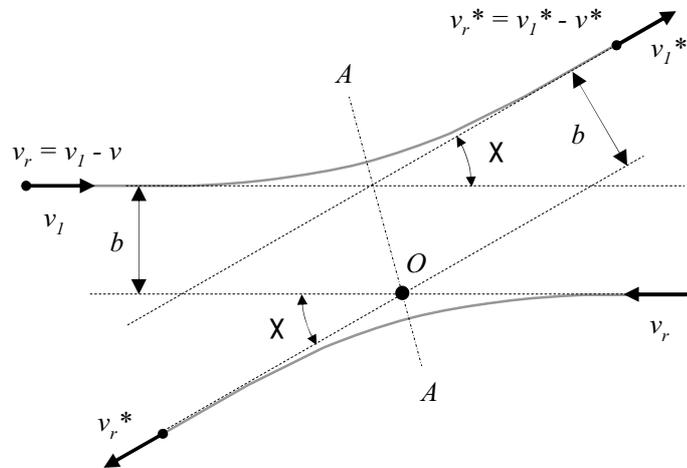


Figura 20: Dinâmica da colisão que altera a distribuição f no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) do espaço de fase no instante t .

Assim, pode-se representar o termo colisional como

$$Q(ff_*) = \left[\frac{\Delta f}{\Delta t} \right]_{Col}^+ - \left[\frac{\Delta f}{\Delta t} \right]_{Col}^-. \quad (2.31)$$

A quantidade de colisões que ocorrem no elemento de volume $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) do espaço de fase que eliminam partículas dessa região é dada pelo número de partículas com velocidade \mathbf{v}_1 (ou partículas de classe \mathbf{v}_1) que colidem com cada uma das partículas com velocidade \mathbf{v} (ou partículas de classe \mathbf{v}) na mesma região.

Observando a Figura 21, o cilindro de colisão direta contém a quantidade de partículas que se chocam com uma partícula de classe \mathbf{v} situada nas proximidades do ponto O , e este número pode ser calculado utilizando-se a expressão

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1) d\mathbf{v}_1 v_r \Delta t b d\epsilon db. \quad (2.32)$$

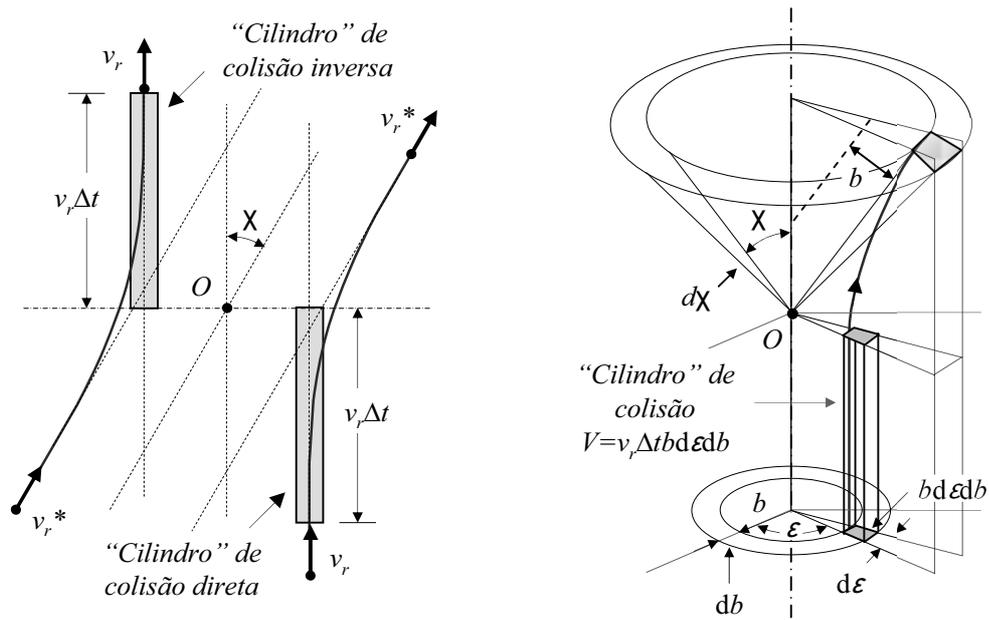


Figura 21: Geometria da colisão e parâmetros de impacto b e ϵ .

A quantidade de partículas de classe \mathbf{v} nas proximidades do ponto O (vide Figura 21) é dada por

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{r}d\mathbf{v}. \quad (2.33)$$

Dessa forma, o número total de partículas que sofrem colisões que as excluem da região no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) do espaço de fase durante o instante t é

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}_1 v_r \Delta t b d\epsilon db d\mathbf{r}d\mathbf{v}. \quad (2.34)$$

Dividindo a expressão acima por Δt e $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ obtém-se a taxa de subtração de partículas por unidade de tempo e unidade de volume de um elemento de área de colisão $b d\epsilon db$ para um determinada velocidade de classe \mathbf{v}_1 , ou seja,

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1) f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}_1 v_r b d\epsilon db. \quad (2.35)$$

Para obter a taxa de subtração no elemento de volume $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{v}) é preciso integrar a quantidade acima para todas as velocidades de classe \mathbf{v}_1 (de $-\infty$ à ∞), para todo b (de 0 à ∞) e para todo ϵ (de 0 a 2π), de tal forma que se obtém

$$\left[\frac{\Delta f}{\Delta t} \right]_{Col}^- = \int f_1 f v_r b d\epsilon db d\mathbf{v}_1, \quad (2.36)$$

onde $f_1 = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1)$ e $f = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$.

Com argumentação semelhante (cilindro de colisão inversa da Figura 21, $v_r^* = \mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}^*$)

e com algumas considerações, como o fato de que $d\mathbf{v}_1^*d\mathbf{v}^* = d\mathbf{v}_1d\mathbf{v}$ [20, 21, 68], chega-se à expressão

$$\left[\frac{\Delta f}{\Delta t}\right]_{Col}^+ = \int f_1^* f^* v_r b \, d\epsilon \, db \, d\mathbf{v}_1, \quad (2.37)$$

onde $f_1^* = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_1^*)$ e $f^* = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}^*)$.

Substituindo as equações (2.36) e (2.37) na equação (2.31), o termo colisional pode ser escrito como

$$Q(ff_*) = \int (f_1^* f^* - f_1 f) v_r b \, d\epsilon \, db \, d\mathbf{v}_1, \quad (2.38)$$

e a equação de Boltzmann toma a forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \int (f_1^* f^* - f_1 f) v_r b \, d\epsilon \, db \, d\mathbf{v}_1. \quad (2.39)$$

2.2.3 Condição de Contorno - Interação Gás-superfície

Além da interação entre partículas, expressa pelo termo colisional $Q(ff_*)$ contido na equação (2.23), existe a interação das partículas com os limites da região do escoamento, os quais geralmente são definidos por contornos sólidos. Não há como determinar exatamente a velocidade de reflexão \mathbf{v}^{ref} de uma partícula incidente com velocidade \mathbf{v}^{inc} , vide Figura 22. O que existem são modelos que indicam qual a probabilidade de uma partícula que incide com velocidade \mathbf{v}^{inc} ser refletida a partir do mesmo ponto onde houve impacto com velocidade entre \mathbf{v}^{ref} e $\mathbf{v}^{ref} + d\mathbf{v}^{ref}$ através do uso de uma densidade de probabilidade denotada por $R(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref})$, que é o chamado núcleo de espalhamento.

O núcleo de espalhamento relaciona a distribuição de velocidades das partículas que deixam a parede, f^{ref} , com a distribuição de velocidades das partículas incidentes, f^{inc} , através da relação [69]

$$f^{ref}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{v_n^{ref}} \int_{v_n^{inc} < 0} |v_n^{inc}| R(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) f^{inc}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}^{inc}. \quad (2.40)$$

O núcleo de espalhamento satisfaz as seguintes propriedades:

- normalização:

$$\int_{v_n^{ref} > 0} R(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) d\mathbf{v}^{ref} = 1, \quad v_n^{inc} < 0; \quad (2.41)$$

- reciprocidade:

$$|v_n^{inc}| \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v}^{inc})^2}{2kT_w}\right) R(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) = |v_n^{ref}| \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v}^{ref})^2}{2kT_w}\right) R(-\mathbf{v}^{ref} \rightarrow -\mathbf{v}^{inc}). \quad (2.42)$$

O modelo mais conhecido de interação gás-superfície, e aplicável em diversos tipos de problemas, é o espalhamento difuso [35, 69] expresso pelo núcleo R_d , cuja expressão é

$$R_d(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) = \frac{m^2 v_n^{ref}}{2\pi(kT_w)^2} \exp\left(-\frac{m(v^{ref})^2}{2kT_w}\right), \quad (2.43)$$

onde v_n^{ref} é a componente normal à superfície da velocidade refletida e T_w é a temperatura da parede (superfície sólida).

O núcleo R_d expressa fisicamente que as partículas são refletidas da parede conforme a distribuição Maxwelliana à temperatura da parede, T_w , o que implica que qualquer informação da partícula incidente não é retida, e a velocidade de reflexão independe do estado pré-colisional da partícula. É como se a partícula incidente fosse absorvida ou “acomodada” pela superfície, e outra fosse emitida conforme a Maxwelliana da parede. Por isso se diz que o espalhamento difuso também pode ser chamado de acomodação perfeita.

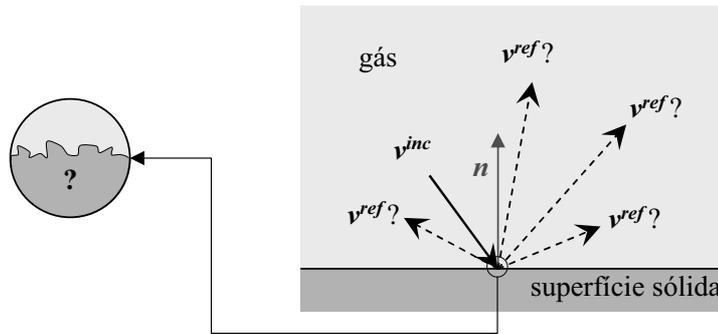


Figura 22: Na interação gás-superfície, a velocidade de reflexão, \mathbf{v}^{ref} , é determinada a partir de uma distribuição de probabilidade.

Embora a hipótese de espalhamento difuso seja válida para diversos tipos de problemas, existem situações onde o núcleo R_d não fornece resultados compatíveis com observações experimentais. Isto acontece particularmente para gases leves, como Hélio e Neônio, e também quando as superfícies são lisas em nível molecular, não contaminadas, situações estas onde é possível considerar que ocorre também a reflexão especular das partículas,

conforme se observa macroscopicamente, por exemplo, no impacto das bolas de um jogo de bilhar nas bordas da mesa.

Visando tratar esta discrepância, Maxwell propôs um núcleo de espalhamento difuso-especular, R_{de} , onde existe um balanço entre a quantidade de reflexões que são consideradas difusas, e a quantidade que são consideradas especulares, balanço este estabelecido pelo coeficiente de acomodação α . Se $\alpha = 1$, então o núcleo de espalhamento é completamente difuso; se $\alpha = 0$, o núcleo é completamente especular. Estas duas situações, e as situações intermediárias, são tratadas conforme a expressão do núcleo difuso-especular, ou seja,

$$R_{de}(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) = \alpha R_d + (1 - \alpha) \delta(\mathbf{v}^{ref} - \mathbf{v}^{inc} + 2\mathbf{n}v_n^{ref}), \quad (2.44)$$

onde δ é a função delta de Dirac: $\delta(x) = 0$ se $x \neq 0$, $\delta(x) = \infty$ se $x = 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1$.

O núcleo de espalhamento difuso-especular já consegue abranger uma gama maior de problemas, mas, como apontam Sharipov [35, 121, 122, 123] e Kalempa [124], alguns problemas mais específicos exigem ainda um tratamento mais sofisticado, onde apenas um coeficiente de acomodação não é suficiente. Assim, o núcleo de espalhamento de Cercignani & Lampis [125] fornece um tratamento mais preciso com o uso de dois coeficientes de acomodação, e pode ser usado quando o núcleo de espalhamento proposto por Maxwell se mostrar inadequado. A adequabilidade ou não do uso de determinado núcleo de espalhamento está associada à verificação experimental dos resultados para o problema em questão, ou problemas semelhantes.

O núcleo de espalhamento de Cercignani & Lampis, R_{cl} , é dado pela expressão

$$\begin{aligned} R_{cl}(\mathbf{v}^{inc} \rightarrow \mathbf{v}^{ref}) = & \frac{m^2 v_n^{ref}}{2\pi\alpha_n\alpha_t(2 - \alpha_t)(kT_w)^2} \\ & \times \exp \left\{ - \frac{m \left[(v_n^{ref})^2 + (1 - \alpha_n)(v_n^{inc})^2 \right]}{2kT_w\alpha_n} - \frac{1}{\alpha_t(2 - \alpha_t)} \right. \\ & \left. \times \frac{m \left[v_t^{ref} - (1 - \alpha_t)v_t^{inc} \right]^2}{2kT_w} \right\} J_0 \left(\frac{\sqrt{1 - \alpha_n} m v_n^{inc} v_n^{ref}}{\alpha_n k T_w} \right), \quad (2.45) \\ & (0 \leq \alpha_t \leq 2; 0 \leq \alpha_n \leq 1), \end{aligned}$$

onde v_t^{ref} é a componente tangencial da velocidade da partícula refletida da parede, v_n^{ref} é a componente normal da velocidade da partícula refletida da parede, v_t^{inc} é a componente tangencial da velocidade da partícula incidente na parede, v_n^{inc} é a componente normal da velocidade da partícula incidente na parede e J_0 denota a função de Bessel modificada de

primeiro tipo e ordem zero, definida como

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos \phi) d\phi. \quad (2.46)$$

O coeficiente α_n está relacionado com a acomodação da parte da energia cinética associada ao movimento normal à superfície, e α_t é o coeficiente de acomodação da quantidade de movimento tangencial à superfície. Quando $\alpha_t = \alpha_n = 0$ a reflexão é especular, e quando $\alpha_t = \alpha_n = 1$ a reflexão é difusa. Se $\alpha_t = 2$ e $\alpha_n = 0$ a reflexão é para trás, ou seja, $\mathbf{v}^{ref} = -\mathbf{v}^{inc}$, o que denota uma superfície rugosa.

2.2.4 Métodos de Solução

Os métodos de solução da equação de Boltzmann (EB) se encaixam em dois grupos principais. O primeiro grupo engloba métodos baseados na solução analítica ou aproximada da equação cinética original, a equação (2.39), ou de equações simplificadas derivadas da original, onde existem vários métodos de solução, vide Sharipov [35] e Kremer [126]. O segundo grupo engloba os métodos que simulam fisicamente o escoamento, e cuja solução tende para a solução exata da EB sob determinadas condições. Neste grupo está a Simulação Direta de Monte Carlo, DSMC (Direct Simulation Monte Carlo), de Bird [68].

Em relação ao primeiro grupo, a grande dificuldade na solução da EB original, dada pela equação (2.39), reside no termo colisional, cujo tratamento é bastante complexo. As técnicas analíticas implementam a solução da EB original a partir de considerações que simplificam o tratamento do termo colisional, mas que implicam em sua validade apenas para números de Knudsen muito pequenos ($\text{Kn} \ll 1$) ou muito grandes ($1 \ll \text{Kn}$), limitando sua aplicabilidade para regimes próximos ao hidrodinâmico e ao de moléculas livres, respectivamente. O método dos momentos de Grad [12] e o método de Chapman-Enskog são exemplos de tais métodos [20, 21, 35].

Ainda no primeiro grupo, os modelos cinéticos modificam a EB original aproximando o termo colisional por expressões mais simples, mas (i) sem comprometer a conservação de massa, energia e momento e (ii) garantindo a observância do “Teorema H” (equivalente cinético da segunda lei da termodinâmica: produção positiva de entropia [69]). São as chamadas equações modelo. O primeiro modelo cinético proposto foi o de Bhatnagar, Gross e Krook [101], mais conhecido como modelo BGK, no qual o termo colisional é dado por

$$Q(f f_*) = \nu(f^M - f). \quad (2.47)$$

onde f^M é a distribuição Maxwelliana de equilíbrio local e ν é a frequência das colisões moleculares.

Embora o modelo BGK apresente um termo colisional de tratamento mais simples, há limitações quanto à sua aplicação: esse modelo é inadequado para escoamentos onde há variação de temperatura. Já o modelo S de Shakhov [127] é um melhoramento do modelo BGK para tratamento de escoamentos não-isotérmicos.

Outra técnica dentro do primeiro grupo é a linearização tanto da EB como das equações modelo para obter soluções de escoamentos perto do equilíbrio. Tais linearizações se fazem assumindo uma função de distribuição do tipo $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = f^M[1 + h(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})]$, com $h \ll 1$, o que permite simplificar as equações de forma a se obter uma solução. Um exemplo do uso desta técnica está no trabalho de Bertoldo [128], onde o escoamento de gases rarefeitos induzido por gradientes longitudinais de temperatura e pressão em um canal formado por placas planas paralelas foi determinado através da resolução da equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de Lennard-Jones.

Os métodos do segundo grupo realizam a simulação física do escoamento através da movimentação das partículas dentro da região do escoamento e calculando a interação das partículas entre si (“choques”), e entre as partículas e os contornos sólidos (“reflexão”) e as fronteiras abertas (retirada/injeção de partículas) do escoamento.

O método de maior interesse prático para a DGR no que tange à engenharia aeroespacial, conforme apontado por Cercignani [13], é a simulação direta de Monte Carlo, conhecida como DSMC (Direct Simulation Monte Carlo), proposta inicialmente por Bird [68]. Isto se deve às características dos escoamentos em torno de veículos aeroespaciais, que envolvem altas velocidades e, muitas vezes, reações químicas.

Em termos gerais, conforme comparação realizada por Sharipov [129] entre a técnica DSMC e a solução da equação cinética, existem situações onde um método é mais adequado do que o outro. Esta comparação está sumarizada na Tabela 1.

As características dos escoamentos analisados neste trabalho (altas velocidades) apontam para o uso da técnica DSMC, e por este motivo ela é aqui utilizada.

Tabela 1: Comparação entre a técnica DSMC e a solução da equação cinética (SEC), e aplicação recomendada.

Método	Vantagens	Desvantagens	Aplicação recomendada
DSMC	(i) Facilmente aplicável a configurações geométricas complexas; (ii) tempo de CPU pouco sensível a generalizações, como consideração de misturas, gases poliatômicos, reações químicas, dissociação, recombinação, etc. (iii) consegue tratar escoamentos com alto desequilíbrio (altas velocidades).	(i) Flutuação estatística pode ser importante, especialmente em baixas velocidades, como ocorre na micro fluidodinâmica.	Escoamentos com altas velocidades (alto Mach), regiões pequenas (compactas) de escoamento, geometrias complexas, escoamentos com dissociação, recombinação, dissociação, etc.
SEC	(i) Ausência de flutuação estatística; (ii) tempo de CPU pequeno para sistemas com baixas velocidades (baixo desequilíbrio); (iii) menor necessidade de memória de computador.	(i) Dificuldade em tratar escoamentos com geometrias complexas; (ii) dificuldade no tratamento de escoamentos reativos.	Escoamentos com baixas velocidades (baixo Mach), regiões mais amplas de escoamento, geometrias simples, escoamentos sem dissociação, recombinação, dissociação, etc.

2.3 Métodos de Monte Carlo

2.3.1 Visão Geral

Os métodos de Monte Carlo fornecem soluções aproximadas para uma série de problemas matemáticos através de amostragens estatísticas realizadas pelo computador a partir de geradores de números aleatórios, cerne do método. Estes métodos aplicam-se tanto a problemas sem cunho probabilístico, como em problemas que são essencialmente de natureza estatística, como os da mecânica estatística, no estudo da cinética dos gases, assunto desta tese.

Dentre os vários métodos matemáticos que fazem uso do cálculo de valores em N pontos no espaço M -dimensional para produzir uma solução aproximada, o método de Monte Carlo tem um erro absoluto que decresce como função de $N^{-1/2}$, ao passo que os métodos tradicionais, sem o uso de algum recurso ou estrutura especial, conseguem, na melhor hipótese, um erro que decresce proporcionalmente a $N^{-a/M}$ (a é uma constante do método) [130]. Isto significa que, se um problema é resolvido em um espaço de várias dimensões (comum, por exemplo, em problemas da mecânica estatística), como $M = 10$ e em N pontos, se este número é aumentado para $2N$, o erro absoluto no método tradicional diminui da ordem de $[1 - (4)^{-1/10}] \approx 13\%$, enquanto que no método de Monte Carlo a diminuição do erro será da ordem de $[1 - (4)^{-1/2}] \approx 50\%$. Para conseguir a mesma diminuição no método tradicional, seria necessários cerca de $1000N$ pontos, o que, compu-

tacionalmente, é muito ineficiente. Esse fato torna o método de Monte Carlo atraente para resolver problemas numéricos no espaço de várias dimensões, particularmente o problema de integração numérica, ou *Integração de Monte Carlo*.

Outra aplicação do método está em possibilitar a amostragem de variáveis que respeitem certa distribuição de probabilidade (pdf's - probability distribution functions, ou funções de distribuição de probabilidade), como a distribuição normal, o que permite simular de forma estatística sistemas que dependam destas variáveis, e a partir de uma análise estatística obter o comportamento mais provável do sistema. O processo de se utilizar “experimentos” com números aleatórios para resolver expressões matemáticas é o que se denomina *Simulação de Monte Carlo* [131].

Uma classe particular da simulação de Monte Carlo está relacionada àqueles problemas da mecânica estatística (cinética dos gases), ou física teórica (estudo de plasmas), cuja solução é obtida não da resolução do modelo matemático (EB), mas sim a partir da simulação direta do modelo físico em questão, uma vez que são modelos de natureza estatística. Neste caso, está se falando da Simulação Direta de Monte Carlo, já citada anteriormente. Neste tipo de simulação se faz uso de amostragens de distribuições pré-determinadas (pdf's, citadas no parágrafo anterior), a partir das quais o comportamento estatístico das variáveis envolvidas no problema é simulado.

2.3.2 Breve Histórico

Métodos de integração de Monte Carlo foram utilizados pela primeira vez logo após a segunda grande guerra, em um computador ENIAC (Electrical Numerical Integrator and Computer), recém terminado em 1946. Foi o primeiro computador eletrônico nos Estados Unidos (18000 válvulas distribuídas em 24 m de comprimento), com a então fenomenal capacidade de realizar 5000 operações por segundo.

Nesta época, cientistas no Laboratório Nacional de Los Alamos estavam trabalhando na construção da Bomba H¹, e analisavam de que forma o ENIAC poderia ajudá-los. Stanislaw Ulam sugeriu que amostragens aleatórias poderiam ser utilizadas para simular as trajetórias do “vão” dos nêutrons. John von Neumann trabalhou nesta idéia, e em 1947 veio com uma proposta detalhada de simulação. Ele estimou que, seguindo 100 nêutrons, seria possível calcular uma “rodada” de colisões entre as partículas em três minutos, de

¹Bomba de Hidrogênio, à fusão nuclear; a bomba atômica - Bomba A - é à fissão nuclear.

forma que 100 conjuntos de colisões poderiam ser computadas em 5 horas. Nick Metropolis denominou este novo método de “Método de Monte Carlo”, em homenagem à respectiva cidade de Mônaco e seus cassinos, uma vez que o método fazia uso de aleatoriedade, como nos jogos de azar.

Em 1959, Metropolis e Ulam [132] publicaram um artigo sobre métodos de Monte Carlo, o qual estimulou uma grande quantidade de trabalhos sobre o método na década de 1950. Infelizmente, naquela época os computadores eram capazes de tratar apenas exemplos triviais das várias aplicações possíveis. Além disso, pesquisadores tentaram aplicar o método de Monte Carlo a todo tipo de problema, mesmo aqueles já bem resolvidos com técnicas existentes. Esta aplicação indevida acabou rendendo uma má fama momentânea para as técnicas de Monte Carlo. Porém, gradualmente isto foi mudando na década de 1960 com o surgimento de técnicas mais eficientes (e computadores melhores), junto com o aprendizado de quais problemas são, e quais não são, apropriados para solução por Monte Carlo. Atualmente, estes métodos são importantes ferramentas para a solução de muitos problemas numéricos.

2.3.3 Erro de Monte Carlo

Uma forma de se estimar a área de um círculo de raio 1 é através da distribuição aleatória de pontos no interior do quadrado definido por $x \in [-1, 1]$ e $y \in [-1, 1]$, conforme mostra a Figura 23. Uma estimativa para a área deste círculo é dada pelo valor da fração destes pontos que estiverem contidos no círculo, valor este que será tanto melhor quanto maior o número de pontos N ($N \rightarrow \infty$). Se a for a área do círculo, e A a área do quadrado, a razão das áreas será

$$\frac{a}{A} = \frac{n}{N} = \frac{\pi}{4}. \quad (2.48)$$

onde n ($n < N$) é o número de pontos que está dentro do círculo.

Pode-se entender n como a soma de variáveis aleatórias n_i - independentes e igualmente distribuídas - assumindo valor 1 se o ponto estiver dentro do círculo, e 0 se não estiver. Neste caso, o método de Monte Carlo consiste em estimar a razão de áreas desejada através da média dos N valores n_i gerados. Esta média é, por sua vez, uma variável aleatória flutuando ao redor do seu valor esperado, $\pi/4$, com uma certa variância, ou desvio quadrático médio. A raiz quadrada desta variância (desvio padrão) constitui uma medida da imprecisão ou erro na determinação do valor médio $\pi/4$.

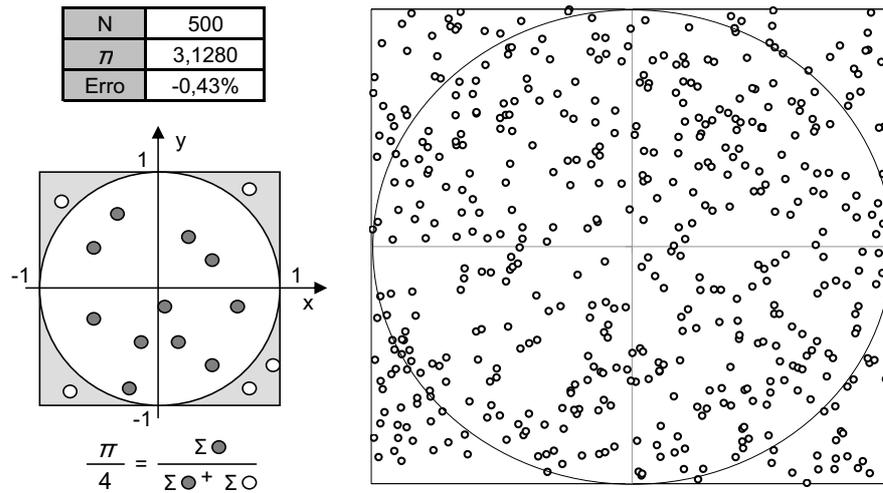


Figura 23: Cálculo do número π através de simulação de Monte Carlo. (Simulação realizada utilizando MS-Excel/VBA.)

Sendo a média de n_i dada por

$$\bar{n} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N n_i. \quad (2.49)$$

e usando o fato de que as variáveis n_i são independentes e igualmente distribuídas, e que o desvio padrão é constante para cada amostra de n_i se estiverem todas num mesmo intervalo, obtém-se

$$\bar{\sigma}_n^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sigma_{n_i}^2 = \frac{1}{N^2} (N \sigma_{n_i}^2) = \frac{1}{N} \sigma_{n_i}^2. \quad (2.50)$$

ou

$$\bar{\sigma}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma_{n_i}. \quad (2.51)$$

onde σ_{n_i} é uma constante.

Dessa forma, é possível perceber que o erro de Monte Carlo diminui de forma proporcional ao inverso da raiz quadrada do número de pontos da amostra, ou seja,

$$\bar{\sigma}_n \propto \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.52)$$

Apesar da simplicidade deste exemplo, o comportamento indicado pela relação (2.52) é comum a todos os métodos de Monte Carlo². Essa relação indica que para se obter um erro estatístico duas vezes menor é preciso um investimento computacional cerca de quatro vezes maior.

²Isso vale inclusive para a técnica DSMC.

2.3.4 Gerador de Números Aleatórios

Em estatística, um número aleatório é um número que pertence a uma série numérica e que não pode ser previsto a partir dos membros anteriores da série, podendo esta série ser significativamente grande.

Geradores de números aleatórios ou randômicos (“random numbers”) constituem o cerne dos Métodos de Monte Carlo. Os computadores não conseguem gerar números aleatórios no estrito sentido de sua definição, já que estes são, teoricamente, imprevisíveis e irreproduzíveis, o que deixa de ser verdade se existirem algoritmos para gerá-los. Na verdade, existem geradores de números pseudo-aleatórios, que são previsíveis e reproduzíveis, mas que podem gerar séries com uma aparência aleatória (aparentemente, sem padrão), característica suficiente para realizar simulações como as de Monte Carlo.

Assim, um bom gerador de números pseudo-aleatórios deve possuir as seguintes características:

- Os números gerados devem seguir uma distribuição uniforme, pois números aleatórios de verdade seguem essa distribuição.
- Os números devem ser estatisticamente independentes entre si. O valor de um número na seqüência não deve afetar o valor do próximo (na prática a maioria dos geradores usa seqüências recursivas, então há essa dependência dos valores anteriores, mas isso não é estatisticamente significativo, daí o destaque para independência estatística).
- A seqüência não deve se repetir nunca. Isso é teoricamente impossível, mas na prática um período de repetição suficientemente grande é o bastante.
- A geração desses números deve ser rápida, de modo a poupar recursos computacionais para as simulações em si.

Os diversos compiladores já possuem geradores de números pseudo-aleatórios, como a função Rnd do Visual Basic, ou a função Rand() do FORTRAN. Os geradores de números pseudo-aleatórios, se não for fornecida uma “semente” (“chute inicial”) diferente, sempre geram a mesma seqüência de números. O Visual Basic, no seu gerador (função Rnd), usa sempre como semente um valor gerado a partir do relógio do sistema, o que garante uma seqüência diferente toda vez que o gerador é utilizado.

2.3.5 Amostragem de Distribuições de Probabilidade

Muitos processos físicos, para serem simulados, necessitam da geração de valores representativos de variáveis que obedecem a uma determinada distribuição estatística. Isto é feito através da geração de números aleatórios, sendo esta uma etapa chave na Simulação de Monte Carlo, e particularmente na Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC). O núcleo de espalhamento visto na seção *Descrição da Equação* (pág.54) é um exemplo de distribuição cuja amostragem é necessária durante uma simulação.

A distribuição de uma variável x pode ser descrita por uma função de distribuição normalizada f_x , tal que a probabilidade de um valor da variável estar entre x e $x + dx$ é dada por $f_x dx$. Se o valor x está num intervalo $[a, b]$, então a probabilidade total será

$$\int_a^b f_x dx = 1. \quad (2.53)$$

Define-se a função de distribuição acumulada como sendo

$$F_x = \int_a^x f_x dx. \quad (2.54)$$

Com estas definições, torna-se possível gerar um número aleatório R_f e fazê-lo igual à F_x . O valor representativo para x será obtido a partir de

$$F_x = R_f. \quad (2.55)$$

Considerando um exemplo trivial, no qual a variável x é uniformemente distribuída no intervalo $[a, b]$, a distribuição f_x será constante e igual a

$$f_x = \frac{1}{b - a}. \quad (2.56)$$

Substituindo a expressão (2.56) na expressão (2.54) obtém-se

$$F_x = \int_a^x \frac{1}{b - a} dx = \frac{x - a}{b - a}. \quad (2.57)$$

Da expressão (2.55) e expressão (2.57) chega-se a

$$x = a + R_f(b - a). \quad (2.58)$$

Mesmo sendo simples, existem situações reais em que a expressão (2.58) é aplicável, como na distribuição de energia rotacional entre duas partículas após um choque na

simulação DSMC para gás diatômico, vista mais adiante neste trabalho.

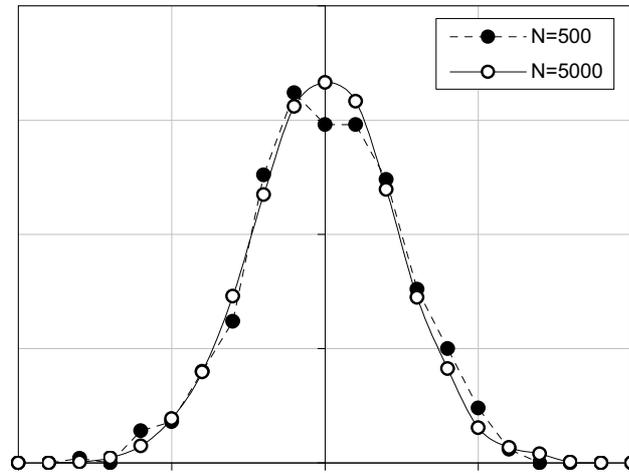


Figura 24: Distribuição normal gerada pelo método de aceitação-rejeição.

Fenômenos como o choque entre partículas, ou de partículas com superfícies, são tratados se utilizando funções de distribuição de probabilidade mais complexas, e para tal é necessário adotar um método de amostragem mais geral, que no caso é o *método de aceitação-rejeição* de amostra [131]. Os passos deste método são:

1. escolher aleatoriamente um valor de x , assumindo que este seja uniformemente distribuído no intervalo em questão (se $x \in [a, b]$, então $x = a + R_f(b - a)$);
2. calcular f_x para este valor de x escolhido, onde f é expressão da distribuição em questão;
3. sendo f_{max} o maior valor possível para f_x no intervalo de variação de x , realizar a seguinte comparação: $f_x/f_{max} > R_f$;
4. se a comparação acima for verdadeira, então x deve ser aceito como amostra, caso contrário deve ser rejeitado, e o procedimento repetido até haver a aceitação (voltar ao passo 1).

A distribuição normal mostrada na Figura 24 foi obtida exatamente desta forma, podendo-se notar que aumentando a quantidade de amostras a curva tende à sua forma exata. É este procedimento que pode ser utilizado para gerar a distribuição de probabilidade, por exemplo, do núcleo de espalhamento difuso R_d , dado pela expressão (2.43).

2.3.6 Amostragem de Velocidade e Energia no Gás em equilíbrio

Embora o critério de aceitação-rejeição envolva um processo repetitivo de cálculo de funções e número aleatórios que diminui a eficiência computacional, ele tem a vantagem de poder ser usado para praticamente qualquer distribuição de probabilidade, e pode ser facilmente implementado.

Porém, existem casos especiais onde a amostragem pode ser realizada de forma direta, sem iterações, utilizando-se expressões analíticas simples. Este é o caso da amostragem de pares de componentes da velocidade térmica (velocidade relativa da partícula em relação à velocidade do escoamento) e da energia interna de gases em equilíbrio (vide Bird [68]), procedimentos estes necessários em simulações numéricas como as vistas neste trabalho.

A função de distribuição de uma componente da velocidade peculiar, V_i , de um gás em equilíbrio é dada por

$$f_{V_i} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta^2 V_i^2), \quad (2.59)$$

onde β é

$$\beta = \sqrt{\frac{m}{2kT}} = \frac{1}{v_m}. \quad (2.60)$$

Se a probabilidade de uma partícula de um gás estacionário ter a componente de velocidade V_i é

$$f_{V_i} dV_i, \quad (2.61)$$

então a probabilidade de uma partícula ter o par de componentes de velocidade (V_i, V_j) é

$$f_{V_i} dV_i f_{V_j} dV_j, \quad (2.62)$$

que, usando a expressão (2.59), pode ser calculada como

$$f_{V_i} dV_i f_{V_j} dV_j = \frac{\beta^2}{\pi} \exp[-\beta^2 (V_i^2 + V_j^2)] dV_i dV_j. \quad (2.63)$$

Usando a transformação de variáveis

$$V_i = v \cos \theta, V_j = v \sin \theta, \quad (2.64)$$

cujo jacobiano é dado por

$$\frac{\partial(V_i, V_j)}{\partial(v, \theta)} = \begin{vmatrix} \partial V_i / \partial v & \partial V_i / \partial \theta \\ \partial V_j / \partial v & \partial V_j / \partial \theta \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \theta & -v \sin \theta \\ \sin \theta & v \cos \theta \end{vmatrix} = v, \quad (2.65)$$

pode-se escrever a expressão (2.63) como

$$f_{V_i} dV_i f_{V_j} dV_j = \exp(-\beta^2 v^2) d(\beta^2 v^2) d\theta / (2\pi) = f_{\beta^2 v^2} d(\beta^2 v^2) f_{\theta} d\theta, \quad (2.66)$$

onde

$$f_{\beta^2 v^2} = \exp(-\beta^2 v^2) \quad (\text{a}) \quad \text{e} \quad f_{\theta} = \frac{1}{2\pi} \quad (\text{b}), \quad (2.67)$$

são as distribuições de probabilidade das variáveis $\beta^2 v^2$ e θ , respectivamente.

A variável $\beta^2 v^2$ é distribuída entre 0 e ∞ conforme a função (2.67(a)), que está na forma de uma distribuição normal. Para esta distribuição a função cumulativa é

$$F_{\beta^2 v^2} = 1 - \exp(-\beta^2 v^2), \quad (2.68)$$

e, observando que R_f e $1 - R_f$ são funções equivalentes, pode-se usar a expressão (2.55) para escrever que

$$v = \frac{\sqrt{-\ln R_f}}{\beta}. \quad (2.69)$$

A variável θ é distribuída entre 0 e 2π conforme a função 2.67(b), ou seja, de forma uniforme, e de acordo com a expressão (2.58), θ pode ser amostrada utilizando

$$\theta = 2\pi R_f. \quad (2.70)$$

Assim, para amostrar as três componentes da velocidade térmica de uma partícula de um gás em equilíbrio, faz-se uso do critério de aceitação-rejeição usando a distribuição dada pela expressão (2.59) para a primeira componente, V_1 , e em seguida obtém-se v e θ usando as expressões (2.69) e (2.70), respectivamente, e calcula-se V_2 e V_3 através da expressões (2.64). Esse procedimento é mais eficiente do que usar o critério de aceitação-rejeição para obter cada uma das três componentes.

Além da amostragem da velocidade peculiar, amostragens da energia interna da partícula também se fazem necessárias nas simulações. Para o caso particular de um gás com dois graus de liberdade internos relativos à energia rotacional³, caso do gás nitrogênio, esta amostragem pode ser feita usando a expressão [68]

$$\epsilon_i = -\ln R_f kT, \quad (2.71)$$

onde ϵ_i é a energia interna de uma partícula, k é a constante de Boltzmann e T a tempe-

³Conforme visto mais adiante, na seção *Etapa 3 - Colisões Intermoleculares*, para gases diatômicos a energia rotacional em torno do eixo unindo os centros dos átomos da molécula pode ser desprezada.

ratura.

2.4 Simulação Direta de Monte Carlo

2.4.1 Visão Geral

A Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC), proposta por Bird [68, 133], é uma técnica baseada na teoria cinética dos gases e que descreve o comportamento macroscópico de escoamentos de gases a partir da simulação física do movimento e interação entre partículas (átomos ou moléculas) representativas do gás. Bird mostrou que o método DSMC fornece resultados consistentes com os resultados numéricos baseados na equação de Boltzmann.

A idéia do método é simular o movimento e interações (colisões entre partículas, e com contornos sólidos) de um grande número de partículas modelo, ou partículas simuladas. O conceito de partícula modelo foi introduzido devido ao fato de que simular todas as partículas reais em um escoamento é inviável computacionalmente devido ao número excessivamente alto destas partículas. Para ser ter uma idéia desse número, um litro de gás ideal na CNTP (condições normais de temperatura e pressão: 1 atm e 0°C) contém cerca de 2.7×10^{22} partículas, quantidade completamente inviável para simulação computacional. Assim, uma partícula modelo representa estatisticamente um número bem maior de partículas reais, conforme ilustra a Figura 25.

A quantidade de partículas reais representadas por uma partícula modelo é dada por

$$F_N = \frac{N_T}{N} \quad (2.72)$$

onde F_N é a razão entre o número de partículas reais, N_T , e o de partículas modelo, N , que são realmente simuladas.

Conforme já mencionado na seção *Erro de Monte Carlo* (pág.69), também aqui o erro estatístico é inversamente proporcional à raiz quadrada do número de partículas modelo simuladas (“tamanho da amostra”), $1/\sqrt{N}$, e o esforço computacional é diretamente proporcional a N .

Resumidamente, no método DSMC, N partículas (modelo) são movimentadas numa determinada região do escoamento, sendo que as coordenadas \mathbf{r}_i e as velocidades \mathbf{v}_i das partículas ($i=1,\dots,N$) são armazenadas na memória do computador. Durante a movimentação há interação entre as partículas (colisões binárias), e entre as partículas e as

fronteiras (sólidas ou não) da região do escoamento do gás. Esta região, por sua vez, normalmente é dividida em uma rede de células, e as propriedades macroscópicas do escoamento podem ser obtidas em cada uma das células a partir de médias adequadas das propriedades individuais das partículas que nela estão contidas em determinado instante. A Figura 26 traz a idéia básica do fenômeno físico por trás do método DSMC.

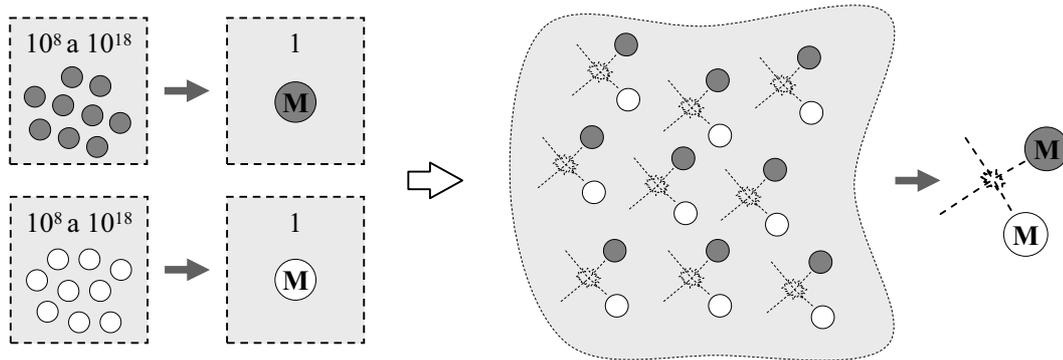


Figura 25: Conceito de partícula modelo.

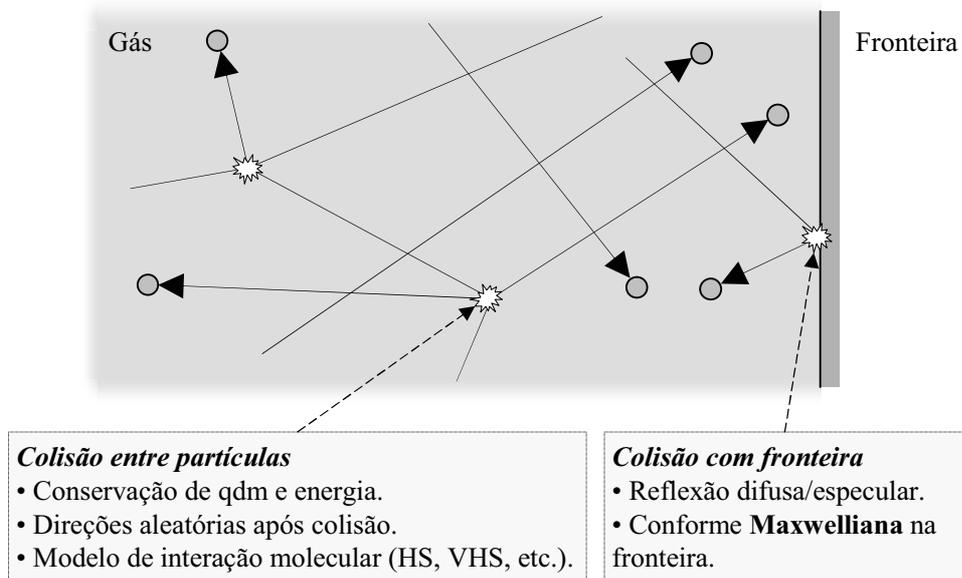


Figura 26: Idéia básica do fenômeno físico no método DSMC.

Uma das aproximações dessa simulação é o desacoplamento entre a movimentação das partículas e a colisão entre elas, que são realizados em passos distintos durante um intervalo de tempo Δt , ou seja, primeiro se realiza o movimento livre das partículas sem colisões intermoleculares, e depois as colisões intermoleculares sem o movimento das partículas. Segundo Bird [68, 133], tal procedimento é válido desde que o valor de Δt utilizado na simulação seja suficientemente menor que o tempo médio de colisão entre as

partículas. Para que os resultados das simulações sejam independentes do intervalo de tempo Δt utilizado, além dessa última condição é necessário que as dimensões das células sejam tais que a variação das características do escoamento através de cada uma delas seja pequena. Mais adiante maiores detalhes sobre estes requisitos são apresentados.

O algoritmo do método DSMC, no esquema denominado NTC (“No Time-Counter”) proposto por Bird, onde a variação do tempo se dá em passos fixos, tem quatro etapas principais, conforme mostra a Figura 27. Cada etapa é descrita na próxima seção.

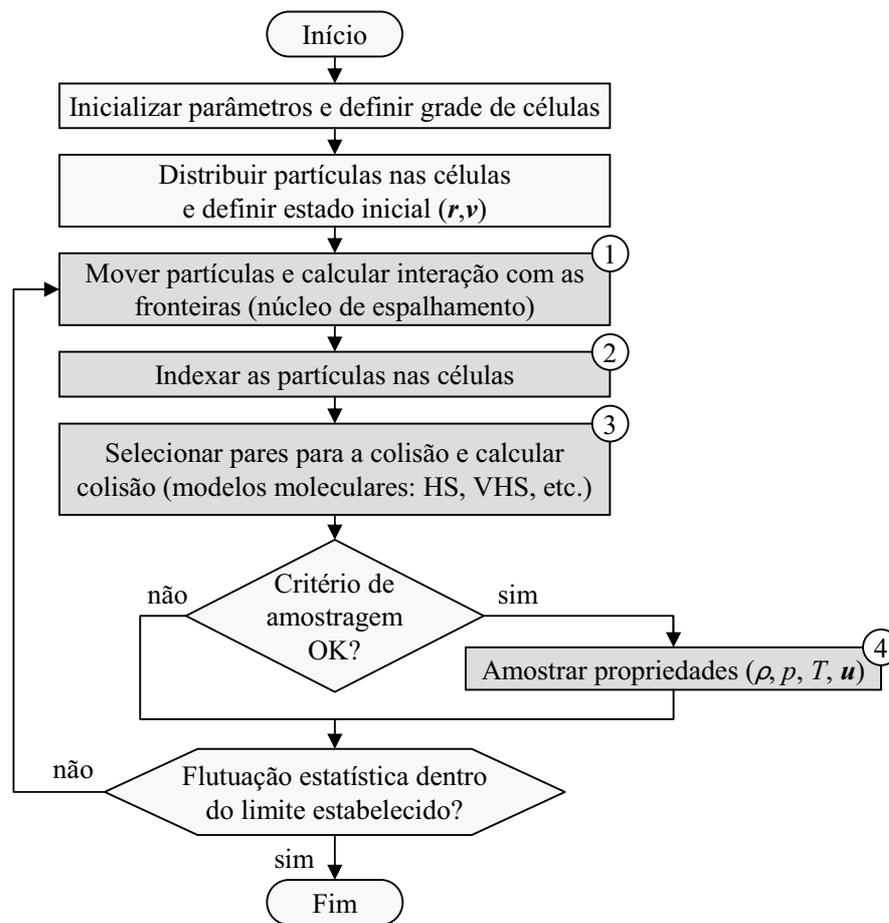


Figura 27: Algoritmo do método DSMC.

2.4.2 Algoritmo

2.4.2.1 Etapa 1 - Movimento Livre

Após a definição dos parâmetros iniciais da simulação, como o número de partículas modelo, o estado inicial (\mathbf{r}, \mathbf{v}) de cada partícula e a grade de células, na primeira etapa do processo iterativo do algoritmo todas as partículas com velocidade \mathbf{v}_i realizam um

percurso no intervalo de tempo Δt . As coordenadas desse percurso, ou “novas coordenadas”, denotadas por $\mathbf{r}_{i,new}$, são calculadas a partir das “velhas coordenadas”, denotadas por $\mathbf{r}_{i,old}$, através de

$$\mathbf{r}_{i,new} = \mathbf{r}_{i,old} + \mathbf{v}_i \Delta t. \quad (2.73)$$

Se a trajetória de uma partícula cruza uma superfície sólida, então a interação gás-superfície é simulada de acordo com determinado núcleo de espalhamento. No presente trabalho a interação difusa é assumida nos dois problemas analisados, ou seja, uma partícula é refletida pela superfície com probabilidade dada pelo núcleo de espalhamento R_d , equação (2.43). Como mostram Nakarjakov et al [134] e Sazhin et al [135], e conforme já comentado na seção *Condição de Contorno - Interação Gás-superfície* (pág.62), o desvio significativo da interação difusa é possível somente para os gases leves, como o hélio, e para uma superfície atômica limpa. No caso do problema da fenda, resultados de Sharipov [75, 74] para orifícios (problema similar) confirmam essa hipótese. No caso do veículo de reentrada SARA, como o gás nitrogênio considerado na simulação possui massa molecular muito maior do que a do hélio, e a superfície do satélite na reentrada da atmosfera possui algum tipo de contaminação, o espalhamento das moléculas na superfície sólida também pode ser assumido como difuso.

Se após o movimento livre uma partícula ficar fora da região de interesse, a informação sobre ela é retirada da memória do computador. Nesta fase também são geradas moléculas novas nas fronteiras da região computacional conforme as condições do gás não perturbado naquele ponto.

Vale comentar aqui que o tratamento da interação gás-superfície como um passo independente no algoritmo DSMC permite a sua fácil extensão para inclusão de efeitos físicos adicionais, como reações químicas, paredes catalíticas e efeitos de radiação [38].

2.4.2.2 Etapa 2 - Indexação das Partículas

Após a movimentação das partículas é necessário que se saiba para qual célula a partícula se deslocou. Isto é fundamental para os próximos passos (colisões intermoleculares e cálculo das grandezas macroscópicas), pois apenas as partículas em determinada célula/subcélula podem colidir, e o cálculo das grandezas macroscópicas só pode ser realizado considerando as partículas que estão em determinada célula naquele instante da simulação. O mecanismo de indexação é ilustrado na Figura 28.

2.4.2.3 Etapa 3 - Colisões Intermoleculares

Seleção dos Pares Colisionais. Nesta etapa as colisões intermoleculares são simuladas. Esta etapa merece uma descrição mais detalhada, pois o procedimento de escolha de parceiros para colidir não é trivial.

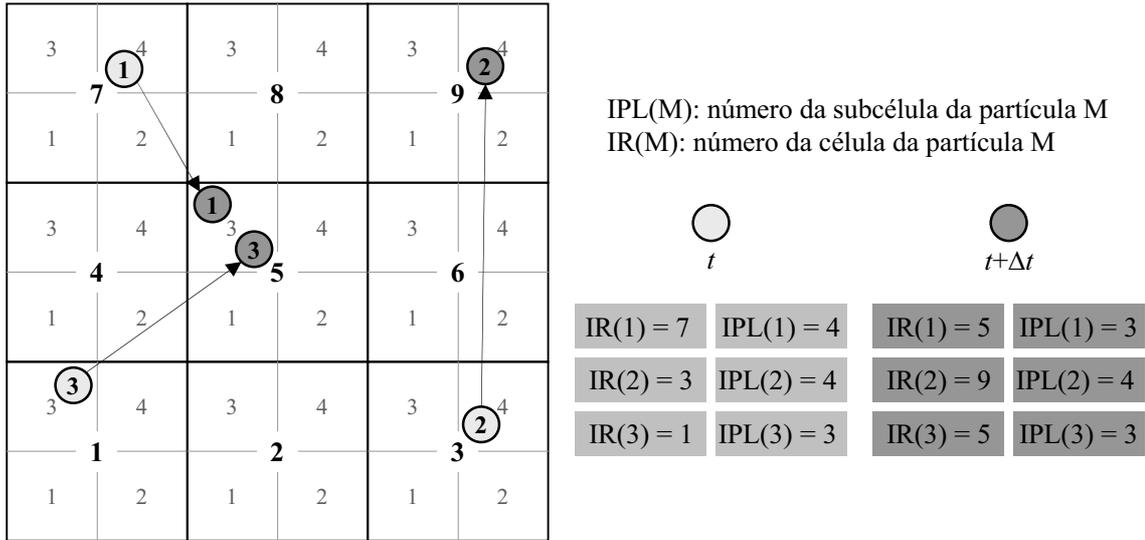


Figura 28: Processo de indexação do algoritmo DSMC.

Seja uma partícula teste com velocidade \mathbf{v}_t se movendo em um campo de partículas com velocidades quaisquer. Considere-se agora apenas as partículas com velocidades entre \mathbf{v} e $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$, referidas como partículas de classe \mathbf{v} , com a respectiva densidade numérica Δn . Neste caso, a velocidade relativa entre a partícula teste e as partículas de classe \mathbf{v} é $\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_t - \mathbf{v}$. Se considerarmos um referencial onde as partículas de classe \mathbf{v} são estacionárias, durante um intervalo de tempo Δt muito menor que o tempo médio de colisão entre partículas, a partícula teste irá colidir com qualquer molécula que tiver seu centro dentro do cilindro $\sigma_T v_r \Delta t$, conforme mostrado na Figura 29. Assim, a quantidade de colisões entre a partícula teste e uma partícula de classe \mathbf{v} num intervalo de tempo Δt é dada por $\Delta n \sigma_T v_r \Delta t$. Considerando que apenas uma parte pequena da trajetória da partícula teste é afetada pelas colisões, pode-se então considerar que o número de colisões por unidade de tempo com uma partícula de classe \mathbf{v} é $\Delta n \sigma_T v_r$. A taxa média de colisão ν é então obtida somando para todas as classes de velocidades, ou seja, para todos os valores de \mathbf{v}_r ,

$$\nu = \sum_{\mathbf{v}_r} (\Delta n \sigma_T v_r) = n \sum_{\mathbf{v}_r} [(\Delta n/n) \sigma_T v_r]. \quad (2.74)$$

Como $(\Delta n/n)$ é a fração de partículas com seção de colisão σ_T e velocidade relativa v_r , a equação (2.74) pode ser reescrita como

$$\nu = n\overline{\sigma_T v_r}, \quad (2.75)$$

onde $\overline{\sigma_T v_r}$ denota o valor médio dessa quantidade para todas as partículas da amostra.

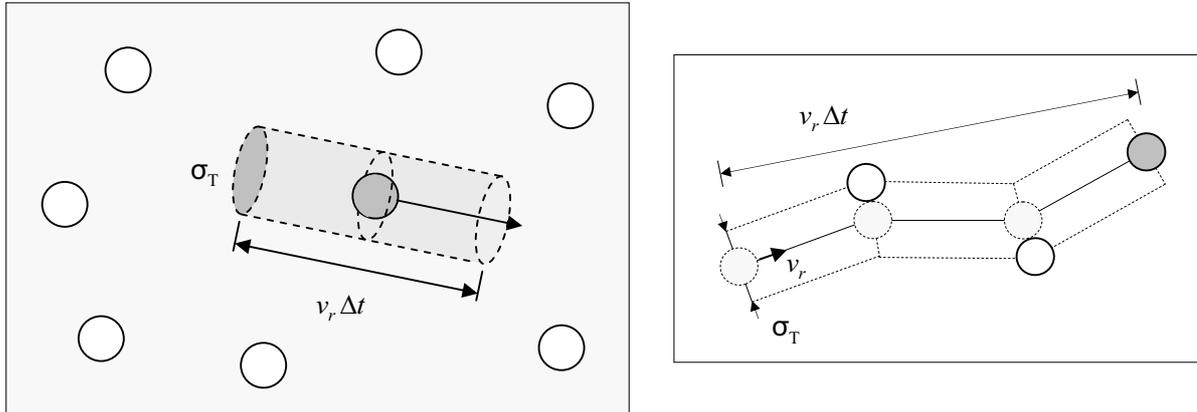


Figura 29: Volume varrido por uma partícula teste de classe v_t em relação a partículas de classe v ($v_r = v_t - v$).

O número total de colisões de partículas reais por unidade de tempo e de volume de um gás é dado, portanto, pela expressão

$$N_{colR(v,t)} = \frac{1}{2}n\nu = \frac{1}{2}n^2\overline{\sigma_T v_r}. \quad (2.76)$$

onde o fator $1/2$ é introduzido pelo fato de uma colisão envolver duas partículas.

O número de colisões de partículas reais no intervalo de tempo Δt no interior de uma célula de volume V_C é

$$N_{colR} = N_{colR(v,t)}\Delta t V_C = \frac{1}{2}n^2\overline{\sigma_T v_r}\Delta t V_C. \quad (2.77)$$

Lembrando que $n = N/V_C = F_N N_P/V_C$, então

$$N_{colR} = \frac{1}{2}F_N^2 N_P^2 \overline{\sigma_T v_r} \Delta t V_C. \quad (2.78)$$

Como a simulação ocorre utilizando partículas modelo, cada uma representando F_N partículas reais, o número de colisões de partículas modelo é N_{colR}/F_N ,

$$N_{col} = \frac{1}{2}F_N N_P^2 \overline{\sigma_T v_r} \Delta t V_C. \quad (2.79)$$

Como N_P é um valor flutuante, para “amortecer” esta flutuação Bird propõe o uso de $N_P \bar{N}_P$ ao invés de N_P^2 , onde \bar{N}_P é o valor médio de N_P computado em todos os intervalos Δt anteriores. Além disso, calcula um número máximo de colisões na célula como

$$N_{col} = \frac{N_P \bar{N}_P F_N (\sigma_T v_r)_{max} \Delta t}{2V_C}. \quad (2.80)$$

Para um par moléculas ser aceito para colisão, e as suas velocidades pós-colisionais serem computadas, realiza-se um teste no qual utiliza-se o método de aceitação-rejeição com a probabilidade dada pela expressão

$$\frac{\sigma_T v_r}{(\sigma_T v_r)_{max}}, \quad (2.81)$$

uma vez que a probabilidade de choque é proporcional à σv_r , o que torna esse procedimento equivalente ao uso da equação (2.79)

A seção de choque das moléculas depende do modelo molecular assumido. Um modelo muito usado, restrito, entretanto, a escoamentos com pouca variação de temperatura, é o de esferas rígidas (modelo HS, Hard Sphere), o qual simplifica muito os cálculos devido a assumir seção constante, e ainda permite não especificar o gás e a sua temperatura. Quando a temperatura varia significativamente no escoamento, o modelo de moléculas rígidas com diâmetro variável (VHS, Variable Hard Sphere) é mais adequado, pois captura de forma mais adequada a variação da viscosidade do gás. Entretanto, ao contrário do modelo HS, o modelo VHS exige a especificação do gás e de sua temperatura no estado não perturbado, e isto restringe a sua aplicação ao gás considerado. Maiores detalhes sobre modelos de interação molecular são apresentados na seção *Modelos de Colisão* (pág.89).

Para o modelo HS, onde σ é constante, a expressão (2.81) pode ser reescrita como

$$\frac{v_r}{(v_r)_{max}}, \quad (2.82)$$

e o critério de aceitação-rejeição é aplicado utilizando-se o teste

$$\frac{v_r}{(v_r)_{max}} > R_f, \quad (2.83)$$

onde R_f é um número aleatório que varia uniformemente entre 0 e 1; quando o teste é verdadeiro, o par é aceito para colisão.

Para o modelo VHS, a condição do critério de aceitação-rejeição utiliza a expressão (2.81), sendo, portanto,

$$\frac{\sigma_T v_r}{(\sigma_T v_r)_{max}} > R_f. \quad (2.84)$$

O produto σv_r é obtido, segundo Bird, usando-se a expressão

$$\frac{\sigma_T v_r}{\sigma_{T_\infty} v_\infty} = \frac{2^{(\omega-\frac{1}{2})}}{\Gamma(\frac{5}{2}-\omega)} v_r^{[2(1-\omega)]}, \quad (2.85)$$

onde σ_{T_∞} e v_∞ são valores de referência para a área da seção de choque e da velocidade molecular mais provável, respectivamente, calculados na temperatura T_∞ , e ω é o expoente de temperatura na expressão de viscosidade,

$$\mu \propto \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^\omega. \quad (2.86)$$

Dinâmica das Colisões Monoatômicas. Após a seleção do par de partículas e sua aceitação para colisão, o estado pós-colisional (velocidades) das partículas deve ser determinado. Isto é feito através da conservação de energia durante a colisão, que no caso monoatômico se resume à conservação da energia translacional das partículas, caracterizando uma colisão elástica, ou seja,

$$E_c = E_c^* \rightarrow E_t = E_t^*, \quad (2.87)$$

onde E_c é a energia pré-colisional, que é o total dos modos de energia (translacional, rotacional e vibracional) considerados na colisão, e E_c^* é a energia pós-colisional do par de partículas; E_t é a energia translacional relativa pré-colisional, e E_t^* é a energia translacional relativa pós-colisional do par de partículas.

Nesse caso, a dinâmica de colisões binárias fornece para as componentes da velocidade relativa entre as partículas após a colisão os seguintes valores (vide Figura 21 para os ângulos),

$$v_{r1} = v_r \cos \chi, \quad (2.88)$$

$$v_{r2} = v_r \sin \chi \cos \epsilon, \quad (2.89)$$

$$v_{r3} = v_r \sin \chi \sin \epsilon, \quad (2.90)$$

onde se utiliza dois números aleatórios, R_f e R'_f , para calcular χ e ϵ do seguinte modo:

$$\cos \chi = 2R_f - 1, \quad \epsilon = 2\pi R'_f. \quad (2.91)$$

Tabela 2: Graus de liberdade vibracionais para o nitrogênio.

T (K)	300	1000	2800	6000	10000	75000
ς_v	0.0	0.2	1.0	1.5	1.7	2.0

Dinâmica das Colisões Diatômicas. Em se tratando de gases diatômicos, como o nitrogênio, o intercâmbio de energia entre as partículas não envolve apenas a energia translacional, mas também outros modos de energia interna, como a rotacional e a vibracional. No caso particular de gases diatômicos, tem-se três graus de liberdade em translação, e dois graus de liberdade em rotação (segundo Bird [68], o terceiro grau de liberdade em rotação pode ser desprezado).

Quanto aos modos de vibração, estes são excitados a temperaturas bem mais elevadas do que os modos de rotação. O número efetivo de graus de liberdade vibracionais de uma molécula diatômica, ς_v , é estimado considerando-a como sendo um oscilador harmônico simples (Bird [68]), e este número pode ser calculado pela expressão

$$\varsigma_v = \frac{2\Theta_v/T}{\exp(\Theta_v/T) - 1}, \quad (2.92)$$

onde Θ_v é a temperatura característica vibracional.

Para o nitrogênio, considerado neste trabalho, $\Theta_v = 3371$ K, e os valores de ς_v para várias temperaturas podem ser vistos na Tabela 2. Analisando esta tabela, nota-se que o número de graus de liberdade em rotação ($\varsigma_r = 2$) predomina sobre o número ς_v para temperaturas até 10000 K, ordem de grandeza do valor máximo esperado para escoamento em torno do satélite. Para $T < 2800$ K, ς_v é menor do que a metade do número de graus de liberdade rotacionais e, para $T < 1000$ K, ς_v pode ser desprezado.

Assim sendo, como uma primeira análise de engenharia da influência da energia interna no cálculo dos parâmetros aerotermodinâmicos do satélite, apenas os modos rotacionais são considerados neste trabalho. Caso um refinamento posterior dos resultados seja necessário ou desejado, particularmente se a influência dos modos internos de energia se mostrar bem relevante, isto exigirá que os modos vibracionais sejam incluídos na análise, especialmente para números de Mach mais elevados, onde o aquecimento cinético é mais intenso.

A Figura 30 ilustra esquematicamente como ocorre a colisão elástica e a colisão inelástica, conforme as hipóteses assumidas acima para gás diatômico.

Dessa forma, a conservação da energia colisional para um gás diatômico com apenas os modos de energia interna rotacional é expressa por

$$E_c = E_c^* \rightarrow E_t + E_r = E_t^* + E_r^*, \quad (2.93)$$

onde E_r é a energia rotacional pré-colisional, e E_r^* é a energia rotacional pós-colisional do par de partículas.

Fica evidente que a energia translacional relativa, ao contrário da colisão elástica, não se mantém na colisão inelástica, pois existe intercâmbio com a energia rotacional. Para se poder avaliar como ocorre a distribuição da energia colisional entre a energia translacional relativa e a rotacional após a colisão, é necessário ter um modelo que descreva este intercâmbio. O mais utilizado é o modelo proposto por Larsen-Borgnakke (descrito em [68]).

Esse modelo estabelece que existe uma distribuição de probabilidade para uma dada relação E_t/E_c pós-colisional para gases diatômicos (com dois graus de liberdade rotacionais internos) dada por

$$\frac{P}{P_{max}} = \left[\frac{5/2 - \omega}{3/2 - \omega} \left(\frac{E_t}{E_c} \right) \right]^{3/2 - \omega} \left[(5/2 - \omega) \left(1 - \frac{E_t}{E_c} \right) \right]. \quad (2.94)$$

Com a distribuição de probabilidade dada pela expressão (2.94), e conhecendo-se E_c^* ($=E_c$), escolhe-se aleatoriamente um valor para E_t^* entre 0 e E_c^* ($E_t^* = R_f E_c^*$), e aplica-se o critério de aceitação-rejeição

$$\frac{P}{P_{max}} > R_f. \quad (2.95)$$

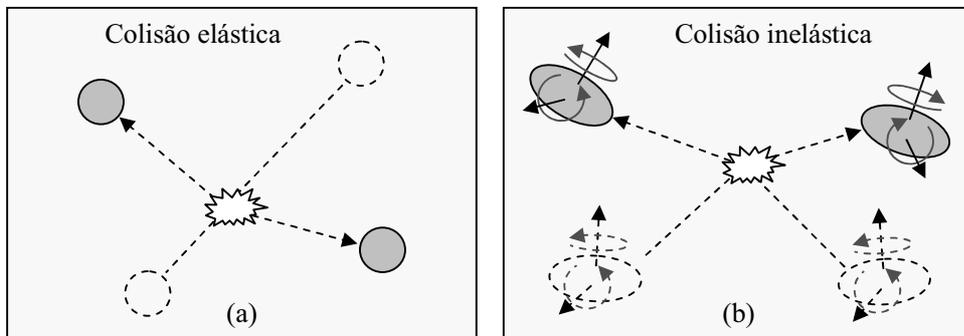


Figura 30: Tipos de colisão.

Uma vez aceito um valor para E_t^* segundo o critério acima, calcula-se a energia rota-

cional pós-colisional do par de partículas como

$$E_r^* = E_c^* - E_t^*. \quad (2.96)$$

A distribuição de probabilidade da divisão da energia rotacional pós-colisional, E_r^* , entre a duas partículas é constante; assim, lembrando a expressão (2.58), sendo a partícula i e a partícula j , a energia rotacional pós-colisional de cada uma será

$$E_{r_i}^* = R_f E_r^*; \quad E_{r_j}^* = E_r^* - E_{r_i}^*. \quad (2.97)$$

O módulo da velocidade relativa entre as partículas após a colisão é obtida utilizando-se

$$v_r = 2\sqrt{\frac{E_t^*}{m}}. \quad (2.98)$$

As velocidades relativas pós-colisionais, com o módulo de \mathbf{v}_r sendo obtido pela expressão (2.98), podem agora ser calculadas utilizando-se as expressões (2.88), (2.89) e (2.90), juntamente com (2.91). Assim, as componentes das velocidades das partículas i e j que colidiram serão, após a colisão,

$$v_{i_k}^* = v_{cmk} + \frac{v_{rk}}{2}, \quad v_{j_i}^* = v_{cmk} - \frac{v_{rk}}{2}, \quad (2.99)$$

onde

$$v_{cmk} = \frac{v_{ik} + v_{jk}}{2}, \quad k = 1, 2 \text{ e } 3 \text{ (direções dos eixos)}, \quad (2.100)$$

e o parâmetro \mathbf{v}_{cm} corresponde à velocidade do centro de massa do par de partículas antes da colisão.

Após as colisões terem sido computadas em todas as células, todas as partículas movem-se livremente por outro intervalo Δt , com suas novas velocidades (se colidiram), ou mantendo as anteriores (se não colidiram). Então, segue-se outro intervalo de tempo e todo o processo colisional é repetido.

Entretanto, conforme apontado por Bird [68], existe um “atraso”, ou tempo de relaxação τ , na troca da energia entre os modos de energia translacional e rotacional. Este é o tempo requerido para que o desvio entre as temperaturas translacional e rotacional decaiam para cerca de $1/e$ do valor do desvio inicial quando ambas tendem ao valor de equilíbrio. Este tempo normalmente é algumas vezes maior que o tempo médio entre as colisões, e é dado por

$$\tau_R = \frac{Z_R}{\nu}, \quad (2.101)$$

onde τ_R é o tempo de relaxação rotacional, Z_R é o número colisional de relaxação rotacional e ν é a frequência das colisões.

Para aplicação do método DSMC, o valor $Z_R = 5$ é geralmente adotado para o caso do nitrogênio (Shen, [14]). Embora Z_R varie com a temperatura, usaremos esse “valor médio” para a análise de engenharia aqui realizada.

A forma de introduzir o tempo de relaxação no código de simulação é estabelecer que apenas uma fração das colisões é inelástica durante um passo de iteração, e esta fração é dada pelo parâmetro X_{inel} definido como

$$X_{inel} = \frac{1}{Z_R} \quad (2.102)$$

para o qual, no caso do nitrogênio, tem-se $X_{inel} = 0.2$.

Para implementar o procedimento fenomenológico acima, um teste é aplicado para selecionar um par de moléculas para a colisão inelástica baseado na comparação

$$X_{inel} > R_f. \quad (2.103)$$

Se a relação (2.103) for verdadeira a colisão é considerada inelástica, caso contrário, é considerada elástica.

No *Apêndice A – Modelo de Larsen-Borgnakke* (pág.175), o referido modelo é discutido com mais detalhes.

2.4.2.4 Etapa 4 - Cálculo das Grandezas Macroscópicas

As propriedades macroscópicas podem ser identificadas pelos valores médios das quantidades moleculares apropriadas em qualquer local do escoamento, desde que haja um número suficiente de partículas dentro de uma célula. Pode-se obter as propriedades macroscópicas de interesse após um tempo de cálculo grande o suficiente para que o escoamento tenha se estabelecido, isto é, tenha se tornado estacionário e as flutuações minimizadas.

Assim, a densidade ρ é calculada através do número de partículas N_p em uma célula,

$$\rho = \frac{mN_p F_n}{V_C}. \quad (2.104)$$

A velocidade hidrodinâmica, ou seja, a velocidade média das partículas na célula é

calculada como

$$\mathbf{u} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{v}_i. \quad (2.105)$$

A temperatura termodinâmica (ou simplesmente temperatura) para gases monoatômicos é dada pela temperatura translacional, T_t , mesmo sem existir equilíbrio termodinâmico (Bird [68]). A temperatura T_t é relacionada com a energia cinética média das partículas relativamente à velocidade hidrodinâmica \mathbf{u} , sendo calculada como

$$T_t = \frac{2}{3kN_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{m\mathbf{V}_i^2}{2}, \quad \mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}. \quad (2.106)$$

Para gases poliatômicos, outros modos de energia estão envolvidos. No caso de gases diatômicos existe a energia rotacional média das partículas, que é traduzida pela temperatura rotacional, T_r , obtida utilizando-se a expressão

$$T_r = \frac{1}{kN_p} \sum_{i=1}^{N_p} E_{ri}. \quad (2.107)$$

Assim, para gases monoatômicos temos que a temperatura é dada por

$$T = T_t, \quad (2.108)$$

ao passo que, para gases diatômicos, define-se a temperatura cinética global⁴ como

$$T_{cg} = \frac{3T_t + 2T_r}{5}. \quad (2.109)$$

Quando existe equilíbrio termodinâmico, $T_t = T_r$, e pode-se escrever para um gás diatômico que

$$T = T_{cg}, \quad (2.110)$$

Deste ponto em diante, para gás diatômico, o termo temperatura estará se referindo à temperatura cinética global do gás.

Por fim, o vetor fluxo de calor pode ser escrito como

$$\mathbf{q} = \frac{1}{V_C} \sum_{i=1}^{N_p} \left(\frac{mV_i^2}{2} + vE_{ri} \right) \mathbf{V}_i, \quad (2.111)$$

⁴Conforme as considerações realizadas na seção *Etapa 3 - Colisões Intermoleculares*, a temperatura vibracional não está sendo considerada neste trabalho.

onde $v = 0$ para gás monoatômico, e $v = 1$ para gás diatômico.

2.4.3 Modelos de Colisão

2.4.3.1 Considerações Gerais

O uso de modelos de colisão molecular adequados é um requisito importante para a aplicação bem sucedida do método DSMC. Tais modelos são baseados em potenciais de interação molecular, já discutidos na seção *Interação entre Partículas* (pág.57), e devem ser fisicamente realísticos.

Vários modelos foram propostos visando capturar a essência física das colisões intermoleculares, que se reflete em se ter valores coerentes para os coeficientes de transporte observados, como os coeficientes de viscosidade e de difusão. Além do potencial de interação, também o aspecto de intercâmbio de energia durante o choque é relevante. Partículas monoatômicas trocam apenas energia translacional durante o choque, ao passo que o choque de partículas poliatômicas envolve também outros modos de energia, como o rotacional e o vibracional, necessitando de algum modelo fenomenológico que descreva a troca de energia entre os diversos modos. Um dos modelos mais usados é o modelo de Larsen-Borgnakke [68], utilizado neste trabalho.

De acordo com Prasanth et.al [136], a escolha de um modelo de colisão para análise de um escoamento decorre de um balanço entre sua habilidade de descrever realisticamente e com exatidão o fenômeno físico modelado, e os requisitos e restrições computacionais associadas ao modelo escolhido. A validação normalmente é feita comparando o resultado do cálculo do coeficiente de viscosidade usando a expressão para o modelo em questão com os resultados experimentais para determinada temperatura de referência. Para tal utiliza-se a primeira aproximação do coeficiente de viscosidade μ à temperatura T para gás simples dada pela teoria de coeficientes de transporte apresentada por Chapman-Cowling [33],

$$\mu = \frac{\frac{5}{8}\sqrt{\pi mkT}}{\left(\frac{m}{4kT}\right)^4 \int_0^\infty \sigma_\mu v_r^7 e^{-mg^2/(4kT)} dv_r}. \quad (2.112)$$

Na expressão (2.112), σ_μ é a seção transversal de viscosidade, calculada como

$$\sigma_\mu = 2\pi \int \text{sen}^2 \chi b db, \quad (2.113)$$

onde o ângulo de espalhamento χ é definido nas Figuras 20 e 21.

Outras áreas relevantes na análise dos modelos de colisão são

$$\sigma_M = 2\pi \int (1 - \cos \chi) b db, \quad (2.114)$$

que é a seção transversal de difusão ou de transferência de momento, e

$$\sigma_T = 2\pi \int b db, \quad (2.115)$$

que é a seção transversal total de choque.

No *Apêndice B – Seções Transversais de Colisão* (pág.179) a origem das seções transversais citadas acima é melhor esclarecida.

Define-se o parâmetro σ como sendo a seção transversal diferencial de choque, dado pela razão entre o número de partículas espalhadas ΔN por unidade de tempo e por elemento de ângulo sólido, e o fluxo de partículas incidentes, ou seja,

$$\sigma = \frac{\Delta N / (\Delta t d\Omega)}{\Delta N / (\Delta t b db d\epsilon)} = \frac{b db d\epsilon}{d\Omega}, \quad (2.116)$$

onde os parâmetros b e ϵ já foram definidos na Figura 21 (pag.61), e o elemento de ângulo sólido $d\Omega$ é definido na Figura 31. Dessa mesma figura tira-se a relação

$$d\Omega = \text{sen } \chi d\chi d\epsilon, \quad (2.117)$$

que permite escrever que

$$\sigma = (b/\chi) |db/d\chi| \quad (2.118)$$

e

$$b db = \sigma \text{sen } \chi d\chi. \quad (2.119)$$

Como σ é sempre positivo (diferencial de área), e $db/d\chi$ é negativo, utiliza-se então $|db/d\chi|$ na equação (2.118) para compatibilizar o sinal.

Substituindo a equação (2.119) nas equações (2.113), (2.114) e (2.115) pode-se reescrever as seções transversais como

$$\sigma_\mu = 2\pi \int_0^\pi \sigma \text{sen}^3 \chi d\chi, \quad (2.120)$$

$$\sigma_M = 2\pi \int_0^\pi \sigma (1 - \cos \chi) \text{sen } \chi d\chi, \quad (2.121)$$

e

$$\sigma_T = 2\pi \int_0^\pi \sigma \text{sen } \chi d\chi. \quad (2.122)$$

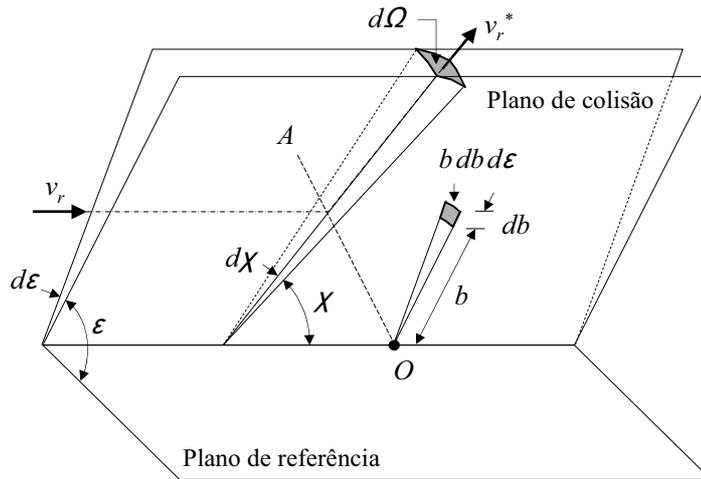


Figura 31: Definição do elemento de ângulo sólido $d\Omega$.

O cálculo das integrais nas equações (2.120), (2.121) e (2.122) está associado à natureza da relação entre σ e b , expressa pela relação (2.118), que depende do potencial de interação assumido pelo modelo de colisão.

2.4.3.2 Principais Modelos

O primeiro modelo utilizado foi o modelo de esferas rígidas, ou **Modelo HS** (Hard Sphere), com o potencial de interação dado pela equação (2.25). Conforme a Figura 32, este potencial se torna efetivo quando

$$r = \frac{1}{2}(d_1 + d_2) = d_{12}, \quad (2.123)$$

de forma que o parâmetro de impacto b é dado por

$$b = d_{12} \sin \theta = d_{12} \cos(\chi/2) \quad (2.124)$$

e

$$|db/d\chi| = \frac{1}{2}d_{12} \sin(\chi/2). \quad (2.125)$$

Substituindo as equações (2.124) e (2.125) na equação (2.118), e usando a relação trigonométrica $\sin \chi = 2 \sin \frac{\chi}{2} \cos \frac{\chi}{2}$, obtém-se

$$\sigma = d_{12}^2/4. \quad (2.126)$$

Também da Figura 32 é possível observar que o ângulo de espalhamento χ pode ser

escrito como

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left(\frac{b}{d_{12}} \right), \quad (2.127)$$

que, no caso do modelo HS, representa um espalhamento isotrópico em relação ao ponto O da referida figura (centro de espalhamento), o que facilita o cálculo da colisão.

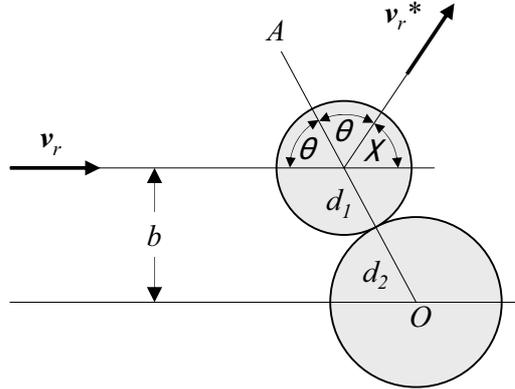


Figura 32: Geometria da colisão no modelo HS.

A área da seção transversal total de choque para o modelo HS é obtido a partir das equações (2.122) e (2.126), e é

$$\sigma_T = 2\pi \int_0^\pi \frac{d_{12}^2}{4} \sin \chi d\chi = \pi d_{12}^2. \quad (2.128)$$

A seções transversais de viscosidade e de transferência de momento são obtidas a partir das equações (2.113), (2.114) e (2.126), que fornecem

$$\sigma_\mu = 2\pi \int_0^\pi \frac{d_{12}^2}{4} \sin^3 \chi d\chi = \frac{2}{3} \pi d_{12}^2 \quad (2.129)$$

e

$$\sigma_M = \int_0^{4\pi} (1 - \cos \chi) \frac{d_{12}^2}{4} d\Omega = \pi d_{12}^2. \quad (2.130)$$

Das equações (2.128), (2.129) e (2.130) observa-se que

$$\sigma_\mu = \frac{2}{3} \sigma_T \quad (2.131)$$

e

$$\sigma_M = \sigma_T. \quad (2.132)$$

A substituição da equação (2.129) na equação (2.112) fornece a expressão da viscosi-

dade para o modelo HS (considerando partículas iguais: $d_1 = d_2 = d$),

$$\mu_{HS} = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k T}}{\pi d^2}. \quad (2.133)$$

A expressão de viscosidade dada pela equação (2.133) indica que $\mu_{HS} \propto T^{1/2}$, enquanto que, para gases reais, a relação observada é aproximadamente $\mu \propto T^{3/4}$. Dados experimentais indicam que a área efetiva da seção transversal total de choque diminui com o aumento da velocidade relativa e da energia translacional relativa, que por sua vez têm suas taxas de variação relacionadas com a variação da viscosidade, ou seja, a área da seção transversal total de choque não é constante conforme previsto pelo modelo HS. Por este motivo, embora a utilização desse modelo tenha suas vantagens do ponto de vista computacional devido a sua maior simplicidade, seu uso deve ser criterioso, particularmente em problemas onde a variação de temperatura no escoamento seja importante.

Como o potencial de esferas rígidas não captura corretamente a variação da viscosidade, e a área da seção de choque não varia com a velocidade relativa nesse modelo, foi então desenvolvido por Bird [68] o **Modelo VHS** (Variable Hard Sphere), ou modelo de esfera rígida variável, baseado no potencial de centro de repulsão. A área da seção total de choque para este potencial, dado pela equação (2.26), obtém-se utilizando-se a expressão

$$\sigma_T = \pi W_m^2 \left(\frac{k}{2E_t} \right)^{2/(\eta-1)}, \quad (2.134)$$

onde W_m é um parâmetro arbitrário que, no caso do modelo HS (lembrando que o potencial de esfera rígida equivale ao potencial de centro de repulsão quanto $\eta \rightarrow \infty$), equivale ao diâmetro da partícula, d , e E_t é a energia translacional relativa que, para partículas iguais de massa m , é dada por

$$E_t = \frac{mv_r^2}{4}. \quad (2.135)$$

Das equações (2.134) e (2.135) percebe-se que $\sigma_T \propto v_r^{-4/(\eta-1)}$, que certamente não é constante para $\eta > 1$ e finito. Para um gás em equilíbrio, como $v_r^2 \propto T$, das equações (2.134) e (2.135) vem que

$$\sigma_T \propto T^{-2/(\eta-1)}. \quad (2.136)$$

Definindo $\sigma_{T,ref}$, d_{ref} , $v_{r,ref}$ e $E_{t,ref}$ como valores de referência para as respectivas grandezas, então para o modelo VHS vale que

$$\frac{\sigma_T}{\sigma_{T,ref}} = \left(\frac{d}{d_{ref}} \right)^2 = \left(\frac{v_r}{v_{r,ref}} \right)^{-2\xi} = \left(\frac{E_t}{E_{t,ref}} \right)^{-\xi}, \quad (2.137)$$

onde $\xi = 2/(\eta - 1)$, e o diâmetro da partícula é dado por

$$d = d_{ref} \left(\frac{v_r}{v_{r,ref}} \right)^{-\xi}. \quad (2.138)$$

O ângulo de espalhamento χ para o modelo VHS também é dado pela equação (2.127) usada pelo modelo HS pois, apesar do fato de se ter agora o diâmetro d da partícula variando com a velocidade relativa segundo a equação (2.137), não existe acoplamento entre o valor de χ e v_r . Assim sendo, conforme Bird, a equação (2.131) também vale para o modelo VHS, e com a ajuda da equação (2.137), é possível escrever

$$\sigma_\mu = \frac{2}{3}\sigma_T = \frac{2}{3}\sigma_{T,ref} \left(\frac{v_r}{v_{r,ref}} \right)^{-2\xi}. \quad (2.139)$$

Substituindo equação (2.139) na equação (2.112) obtém-se a viscosidade para o modelo VHS,

$$\mu_{VHS} = \frac{\frac{15}{8}\sqrt{\pi m k}(4k/m)^\xi T^{\frac{1}{2}+\xi}}{\Gamma(4-\xi)\sigma_{T,ref}v_{r,ref}^{2\xi}}. \quad (2.140)$$

Da equação (2.140) observa-se que

$$\mu_{VHS} \propto T^\omega, \quad (2.141)$$

onde

$$\omega = \frac{1}{2} \frac{\eta + 3}{\eta - 1}. \quad (2.142)$$

Para o caso do potencial de esfera rígida, que equivale a $\eta \rightarrow \infty$, tem-se $\omega = \frac{1}{2}$, que representa a partícula “mais dura”. Para a partícula Maxwelliana, quando $\eta = 5$, tem-se $\omega = 1$, e a vantagem desse valor trazer simplificações em trabalhos analíticos; corresponde à partícula “mais macia” dentre todos os modelos.

Embora o modelo VHS seja o modelo mais amplamente utilizado em simulação de escoamento de gases rarefeitos [136], tanto ele como o modelo HS apresentam uma mesma deficiência, que é considerar que as seções transversais de viscosidade e de transferência de momentum, ambas dadas para os dois modelos pelas equações (2.131) e (2.132), respectivamente, tenham uma relação contante entre elas, ou seja,

$$\frac{\sigma_\mu}{\sigma_M} = \frac{2}{3}, \quad (2.143)$$

que é consequência de se considerar o espalhamento χ como isotrópico.

Segundo o modelo de centro de repulsão, a relação σ_μ/σ_M deve variar conforme uma lei

exponencial. Assim, com o intuito de considerar não só o potencial de centro de repulsão, como também o potencial de Lennard-Jones, Koura & Matsumoto [137] propuseram o **Modelo VSS** (Variable soft-sphere), ou modelo de esfera macia variável. Neste modelo, o diâmetro da partícula varia da mesma forma que no modelo VHS, vide equação (2.138), porém o ângulo de espalhamento não é mais isotrópico, sendo dado neste modelo por

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left(\frac{b}{d_{12}} \right)^{1/\alpha}. \quad (2.144)$$

O valor do expoente α na equação (2.144) geralmente varia entre 1 e 2. No caso dos modelos HS e VHS, tem-se que $\alpha = 1$. Quando $\alpha > 1$, o ângulo de espalhamento χ é menor do que no caso dos modelos HS e VHS.

Entretanto, a deficiência do modelo VHS, corrigido no modelo VSS pelo uso do fator α , é mais evidente onde o fenômeno de difusão é importante, especialmente em escoamento de misturas. No caso de gases simples, essa deficiência não tende a ser relevante. É o caso dos escoamentos estudados neste trabalho.

Ainda em relação a modelos de colisão, tendo em vista o tratamento de gases mais complexos (misturas e partículas polares), em 1993 Hassan & Hash [138] propuseram o **Modelo GHS** (Generalised Hard-sphere Model), ou Modelo Generalizado de Esfera Rígida. Trata-se de uma extensão dos modelos VHS e VSS, diferindo na forma como é tratada a variação da área transversal de choque como função da energia translacional relativa, e permite um melhor tratamento de escoamento de misturas. Fan [139] propôs o **Modelo GSS** (Generalised Soft-sphere Model), ou Modelo Generalizado de Esfera Macia, que inclui aos modelos anteriores a consideração de partículas polares. No **Modelo VS** (Variable Sphere), ou Modelo de Esfera Variável, Matsumoto [140] uniu em um modelo comum os modelos VHS e VSS, sendo aplicável a grande variedade de tipos de escoamentos.

2.4.4 Fronteiras Abertas

As regiões de análise de escoamentos geralmente são delimitadas não só por fronteiras sólidas, ou superfícies, mas também por fronteiras abertas, por onde há fluxo de massa. Mas este fluxo, em nível de partículas, ocorre nos dois sentidos, para dentro e para fora da região de escoamento através da fronteira. Assim, novas partículas devem ser continuamente injetadas no campo de escoamento para simular corretamente o fenômeno físico. Esta situação é ilustrada na Figura 33.

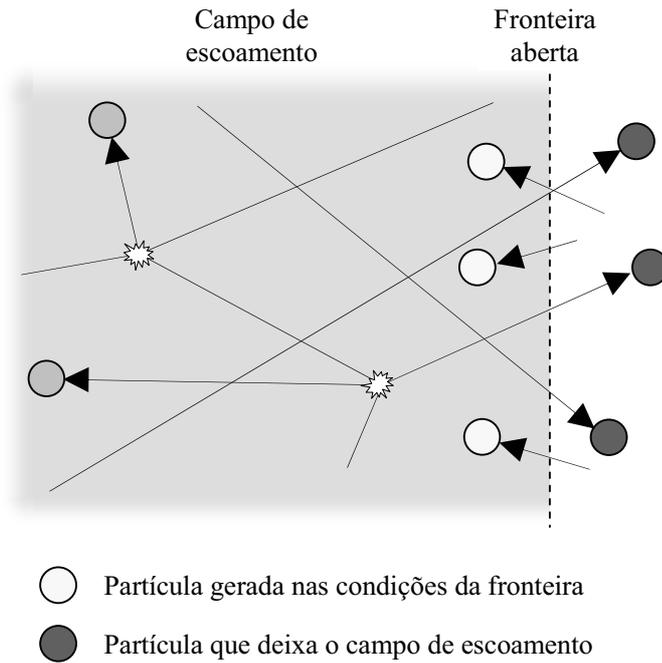


Figura 33: Processo de “reposição” de partículas nas fronteiras abertas.

As novas partículas devem ser incluídas respeitando as condições na fronteira por onde são inseridas, como temperatura e distribuição de velocidade. Bird [68] mostra que o fluxo de partículas por unidade de área, \dot{N}_A , pode ser calculado pela expressão

$$\dot{N}_A = \frac{n}{2\beta\sqrt{\pi}} \left\{ \exp(-s^2 \cos^2 \theta) + \sqrt{\pi} s \cos \theta [1 + \operatorname{erf}(s \cos \theta)] \right\}, \quad (2.145)$$

onde $s = \beta u$, com β definido conforme a expressão (2.60), u é o módulo da velocidade hidrodinâmica local do escoamento e θ é o ângulo que a velocidade hidrodinâmica \mathbf{u} forma com a normal à superfície \mathbf{n} , conforme ilustra a Figura 34.

A quantidade de partículas N_{fr} que adentram a região do escoamento através do elemento de área de fronteira A_{fr} no intervalo de tempo Δt é

$$N_{fr} = \dot{N}_A A_{fr} \Delta t. \quad (2.146)$$

Definidas as quantidades que entram em cada região da fronteira através da expressão (2.146), é preciso definir a velocidade de cada partícula e, conforme o modelo de colisão (elástico/monoatômico ou inelástico/diatômico), qual é a energia interna da partícula.

De acordo com Bird [68], as componentes das velocidades da partícula que entram na região de escoamento e são paralelas (tangentes) à fronteira, v_{t1} e v_{t2} , Figura 35, obedecem à distribuição das componentes da velocidade do gás estacionário, ou seja,

podem ser geradas à temperatura da fronteira utilizando-se as expressões (2.69) e (2.70). Já a componente normal da velocidade da partícula, v_n , depende da componente da velocidade hidrodinâmica normal à superfície, u_n , e é calculada como

$$v_n = u_n + V_n. \quad (2.147)$$

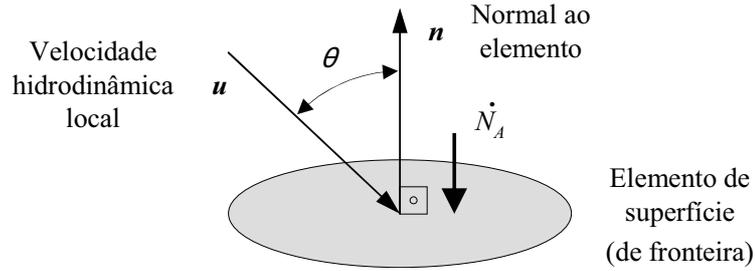


Figura 34: Fluxo de partículas através de uma superfície.

A distribuição da componente da velocidade peculiar normal à superfície, f_{V_n} , relativa à velocidade mais provável, $v_m = 1/\beta$, é da forma

$$f_{V_n} \propto (\beta V_n + s_n) \exp(-\beta^2 V_n^2), \quad (2.148)$$

onde $s_n = \beta u_n$ é a razão de velocidade baseada na componente normal da velocidade hidrodinâmica.

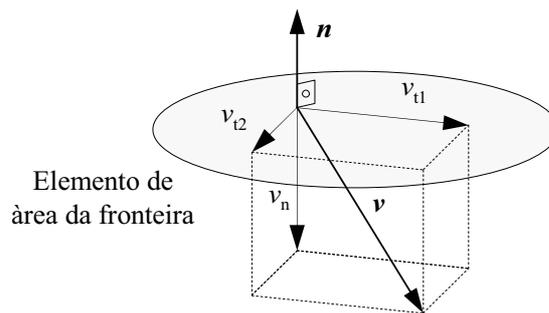


Figura 35: Componentes da velocidade da partícula injetada na fronteira.

O máximo dessa distribuição ocorre em

$$\beta V_n = \frac{\sqrt{s_n^2 + 2} - s_n}{2}, \quad (2.149)$$

e razão entre a probabilidade e a probabilidade máxima é

$$\frac{P}{P_{max}} = \frac{2(\beta V_n + s_n)}{s_n + \sqrt{s_n^2 + 2}} \exp \left\{ \frac{1}{2} + \frac{s_n}{2} [s_n - \sqrt{s_n^2 + 2}] - \beta^2 V_n^2 \right\}. \quad (2.150)$$

Assim, através do critério de aceitação-rejeição, geram-se valores de βV_n uniformemente distribuídos numa faixa que contemple todos os valores possíveis tal que a velocidade $\beta V_n + s_n$ seja direcionada para dentro do escoamento, e utiliza-se a expressão (2.150) para aceitar a amostra. Uma vez aceita, v_n é calculada usando-se a expressão (2.147).

2.4.5 Fator de Peso

Em escoamentos com simetria axial, como o escoamento em torno do satélite analisado neste trabalho, existe a tendência das células da malha que estão mais próximas do eixo de simetria conterem menos partículas do que as células mais afastadas, o que, do ponto de vista de uma simulação estatística, não é benéfico. Para resolver este desbalanceamento Bird [68] propôs o uso de fatores de peso (“weighting factors”), de tal forma que as partículas modelo mais próximas do eixo representem menos partículas reais do que as mais afastadas com o respectivo aumento do número dessas partículas modelo. Isto é conseguido definindo o que se denominam fatores de peso, os quais definem zonas de peso delimitadas por raios de referência. Quando uma partícula atravessa a superfície definida por um raio de referência no sentido do eixo, ela é duplicada; quando duas partículas atravessam esta superfície no sentido contrário, uma delas é retirada. Isto é realizado mantendo a conservação de massa, quantidade de movimento e energia cinética, de tal forma que o efeito líquido é equivalente às expressões

$$\begin{aligned} m_1 &= m_2 + m_2, \\ m_1 v &= m_2 v + m_2 v, \\ m_1 v^2 &= m_2 v^2 + m_2 v^2. \end{aligned} \quad (2.151)$$

Os subscritos 1 e 2 nas relações (2.151) correspondem às partículas representadas na Figura 36, e a Figura 37 ilustra o efeito da aplicação dos fatores de peso na distribuição das partículas na simulação DSMC.

Para minimizar o inconveniente de se ter, após o processo de duplicação, duas partículas iguais numa célula (situação não realística), a segunda partícula é introduzida na célula somente após a primeira partícula ser introduzida com um pequeno atraso correspondente ao intervalo de tempo utilizado nas iterações da simulação. O processo de

retirada de partículas que atravessam um raio de referência no sentido oposto ao eixo de simetria é feito de forma estatística: a partícula só continua na simulação se passar no teste de aceitação-rejeição considerando-se 50% de probabilidade.

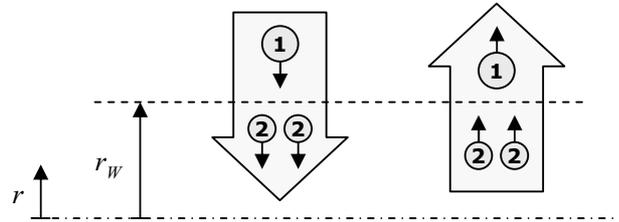


Figura 36: Raios de referência para fatores de peso.

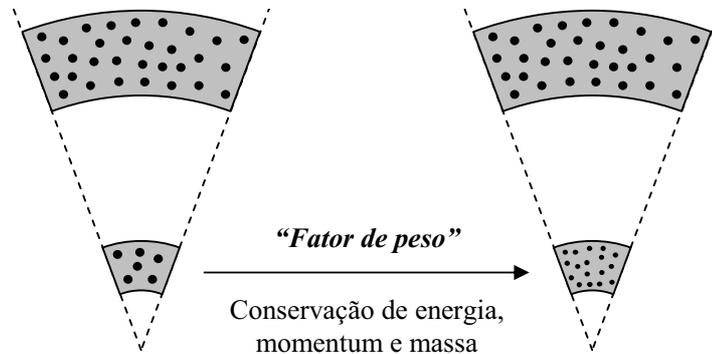


Figura 37: Fatores de peso compensam o menor número de partículas por célula na direção do eixo de simetria axial.

Embora o uso de fatores de peso seja uma prática indicada para escoamentos com simetria axial, eles podem ser úteis em escoamentos com simetria plana onde existam regiões de maior gradiente das propriedades nas proximidades do eixo de simetria, pois nesta região a discretização da malha de células tende a ser maior, implicando em células menores. Nesta situação ocorre fenômeno semelhante ao do escoamento com simetria axial. Isto acontece no escoamento através de uma fenda estreita, analisado neste trabalho. Como será visto mais adiante, no cálculo deste escoamento também algumas distâncias de referência a partir do eixo de simetria foram definidas para estabelecer algumas zonas de peso.

2.4.6 Considerações sobre Fontes de Erros

Basicamente existem dois grupos de fontes de erro que podem afetar a precisão e exatidão do método DSMC quando utilizado na análise de escoamentos [38, 141]. A pre-

cisão está relacionada ao nível de oscilação dos resultados em torno de um valor esperado, correto ou não. Já a exatidão está relacionada com a diferença entre o resultado obtido e o resultado correto: quanto menor a diferença, maior a exatidão. O que se almeja é exatidão com precisão.

O primeiro grupo está associado às aproximações computacionais, as quais influenciam basicamente na precisão numérica. Os parâmetros relevantes incluem o número de partículas reais representadas por uma partícula modelo, o nível de discretização da grade de células utilizada na simulação e o intervalo de tempo entre as iterações. Espera-se que resultados melhores sejam obtidos com o uso do maior número possível de partículas modelo, menor discretização possível da grade de células, e um intervalo de tempo o menor possível em comparação com o tempo médio entre colisões [109]. Porém, para uma melhor eficiência computacional e por restrições de memória das máquinas digitais, estes valores são limitados. Para verificar a influência destes fatores nas simulações e fazer um balanço adequado entre a precisão desejada e o esforço computacional necessário e possível, uma análise paramétrica se torna necessária para avaliar a real precisão numérica dos resultados das simulações realizadas. Nos capítulos referentes aos escoamentos analisados tais análises são apresentadas.

A segunda fonte está associada à adequabilidade das hipóteses e modelos físicos adotados nas simulações, que influenciam essencialmente na exatidão dos resultados. Isto inclui o modelo de interação entre as partículas e o modelo de interação gás-superfície utilizados. Considerações sobre a adequabilidade destes modelos já foram apresentadas nas seções *Condição de Contorno - Interação Gás-superfície* (pág.62) e *Etapa 3 - Colisões Intermoleculares* (pág.80).

3 *Escoamento através de Fenda*

Este capítulo apresenta e discute os resultados do cálculo do escoamento através de uma fenda, que é um escoamento interno. O gás é considerado monoatômico e o fluxo de massa adimensional é calculado para vários níveis de rarefação e razões de pressão. Visualizações dos campos de densidade e temperatura, bem como das linhas de corrente, são apresentadas. Uma fórmula de interpolação para o fluxo de massa adimensional através da fenda é proposta, ficando disponível para uso em escoamentos com geometria similar.

3.1 Descrição do Problema

A configuração geométrica do problema analisado, o escoamento através de uma fenda, é mostrada na Figura 38. Trata-se de uma fenda estreita posicionada no plano $x = 0$ que separa dois reservatórios de grandes dimensões. O primeiro reservatório contém gás a uma pressão p_0 , enquanto que a pressão no outro reservatório é menor e igual a p_1 . Nos dois reservatórios a mesma temperatura de estagnação T_0 é mantida constante. A fenda possui uma altura a que se estende na direção y de $-a/2$ a $a/2$, e é infinita na direção z . O gás escoo do reservatório com pressão p_0 para aquele com pressão p_1 (menor).

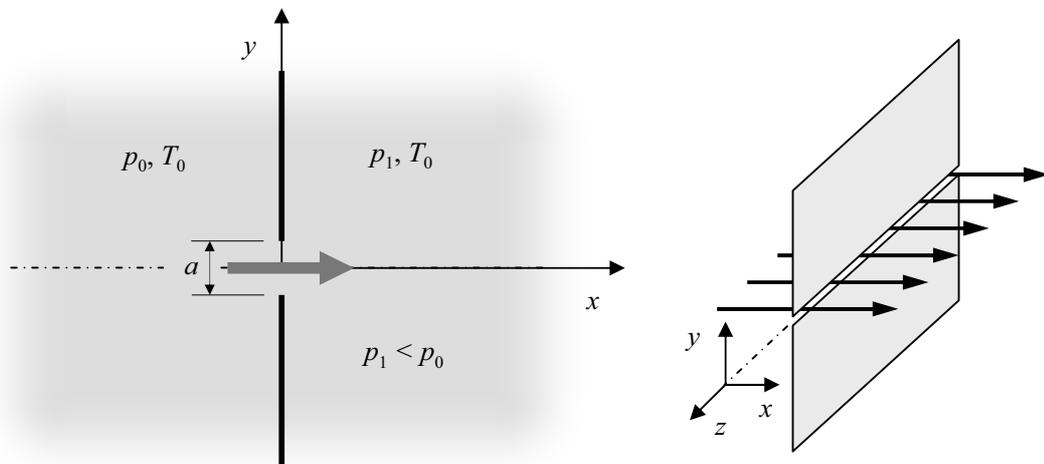


Figura 38: Configuração geométrica da fenda.

Neste trabalho é calculado o fluxo de massa através da fenda, e o campo de escoamento é caracterizado através das linhas de corrente e das distribuições de densidade e temperatura para várias razões de pressão, desde o regime de moléculas livres até o regime hidrodinâmico. O método DSMC, conforme descrito na seção *Simulação Direta de Monte Carlo* (pág.76), é utilizado no processo de solução.

3.2 Processo de Solução

3.2.1 Parâmetros Determinantes do Escoamento

A solução deste problema é governada por dois parâmetros. O primeiro deles é o parâmetro de rarefação δ [17, 36] definido como

$$\delta = \frac{a p_0}{\mu_0 v_0}, \quad v_0 = \sqrt{\frac{2kT_0}{m}}, \quad (3.1)$$

onde v_0 é a velocidade molecular mais provável (módulo) e μ_0 é a viscosidade, ambos na temperatura T_0 . Ou seja, δ é definido considerando as condições do reservatório à montante (escoamento não perturbado).

O uso do parâmetro de rarefação conforme definido pela equação (3.1) decorre do fato do número de Knudsen ser definido em função do LCM, que por sua vez depende do modelo de colisão adotado. Conforme mostrado por Bertoldo [128], o parâmetro de rarefação não depende do modelo utilizado, facilitando a comparação entre resultados obtidos a partir do uso de outros modelos.

Considerando que a razão $\mu_0 v_0 / p_0$ é proporcional ao LCM, λ , é possível notar que o parâmetro de rarefação é inversamente proporcional ao número de Knudsen, e de acordo com Sharipov & Seleznev [35], no caso do potencial de esferas rígidas (modelo HS), esta relação é dada por

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\text{Kn}}. \quad (3.2)$$

Dessa forma, o limite $\delta \rightarrow 0$ ($\text{Kn} \rightarrow \infty$) corresponde ao regime de moléculas livres, onde as colisões entre as partículas são raras, sendo a alteração no padrão de escoamento devido apenas às interações partículas-superfície. O limite $\delta \rightarrow \infty$ ($\text{Kn} \rightarrow 0$) corresponde ao regime hidrodinâmico, onde as interações partícula-partícula são frequentes, e o conceito de meio contínuo é válido, tornando as equações de Navier-Stokes aplicáveis.

O segundo parâmetro determinante da solução é a razão entre as pressões nos reservatórios, p_1/p_0 .

Para o regime de moléculas livres, $\delta \ll 1$, existe a possibilidade de se obter solução analítica, vide Sharipov & Seleznev [35] e Sharipov [105]. O fluxo de massa por unidade de comprimento na direção z para esse escoamento é

$$\dot{M}_{ml} = \frac{a p_0}{\sqrt{\pi} v_0}. \quad (3.3)$$

Tendo o fluxo expresso segundo a equação (3.3), define-se o fluxo de massa adimensional W como

$$W = \frac{\dot{M}}{\dot{M}_{ml}}, \quad (3.4)$$

onde \dot{M} é o fluxo de massa por unidade de comprimento da fenda na direção z para valores arbitrários do parâmetro de rarefação δ e de razão de pressão p_1/p_0 .

Assim, neste trabalho será determinado o fluxo de massa adimensional através da fenda segundo a definição dada pela equação (3.4).

3.2.2 Hipóteses e Parâmetros da Simulação DSMC

Conforme apontado por Sharipov [74, 75] na análise do escoamento através de orifícios, que é similar ao escoamento através de fendas, este tipo de escoamento é pouco sensível ao modelo de interação gás-superfície adotado, conforme mostra a Tabela 3. Esta tabela apresenta resultados considerando o núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis, dado pela expressão (2.45), para valores limites dos coeficientes de acomodação α_n e α_t (que inclui o espalhamento difuso), sendo a média da diferença percentual entre valores do fluxo W da ordem de 1%. Dessa forma, o núcleo de espalhamento difuso, conforme expresso pela equação (2.43), foi adotado no cálculo do escoamento.

Resultados desses mesmos trabalhos, inclusos também na Tabela 3, mostram que a diferença decorrente do uso do modelo de esfera rígida (HS) e do modelo de esfera rígida variável (VHS) não excedem, na média, a 0.5%. Dessa forma, o cálculo realizado neste trabalho adotou o modelo de esfera rígida, computacionalmente mais eficiente.

Quanto às fronteiras abertas, a quantidade de partículas novas injetadas no escoamento é obtida utilizando-se a expressão (2.145) considerando $s = 0$ (escoamento não perturbado, onde $v = 0$) e o substituindo na expressão (2.146), o que fornece

$$N_E = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} n_E v_m A_{fr} \Delta t \quad (3.5)$$

para o reservatório esquerdo, e

$$N_D = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} n_D v_m A_{fr} \Delta t \quad (3.6)$$

para o reservatório direito, lembrando que n representa a densidade numérica.

A velocidade das partículas injetadas obedece a distribuição Maxwelliana na temperatura da fronteira, T_0 , sendo portanto obtida utilizando-se as expressões (2.69) e (2.70).

Tabela 3: Influência dos parâmetros de acomodação (α_n e α_t) e do modelo de interação molecular (HS e VHS) no fluxo de massa adimensional W através de orifício.

		W				
		HS			VHS	
p_1/p_0	δ	$\alpha_t = 0$ $\alpha_n = 0$	$\alpha_t = 0.5$ $\alpha_n = 1$	$\alpha_t = 1$ $\alpha_n = 1$	$\alpha_t = 2$ $\alpha_n = 0$	$\alpha_t = 1$ $\alpha_n = 1$
0	0.1	1.010	1.010	1.014	1.010	1.014
	1	1.122	1.129	1.129	1.119	1.115
	10	1.420	1.454	1.462	1.448	1.446
0.1	0.1	0.911	0.910	0.910	0.913	0.910
	1	1.028	1.034	1.032	1.024	1.020
	10	1.391	1.426	1.435	1.454	1.415
0.5	100	1.471	1.514	1.524	1.536	1.521
	0.1	0.511	0.508	0.509	0.506	0.507
	1	0.609	0.613	0.613	0.604	0.603
	10	1.123	1.173	1.188	1.190	1.160
	100	1.251	1.326	1.344	1.369	1.344

(Fonte: ref.[75].)

Nas regiões próximas da fenda, onde os gradientes das propriedades do escoamento são mais pronunciados, a discretização é maior. Na região compreendida entre $-a/2 \leq x \leq a/2$ e $a/4 \leq y \leq a/2$ o tamanho da célula é duas vezes menor e equivalente a $a/80$, e na região entre $-a/4 \leq x \leq a/4$ e $3a/8 \leq y \leq a/2$ o tamanho é quatro vezes menor e igual a $a/160$.

Simulações mostraram que uma discretização maior e um domínio maior ocasionam uma diferença no fluxo de massa da ordem de apenas 1%.

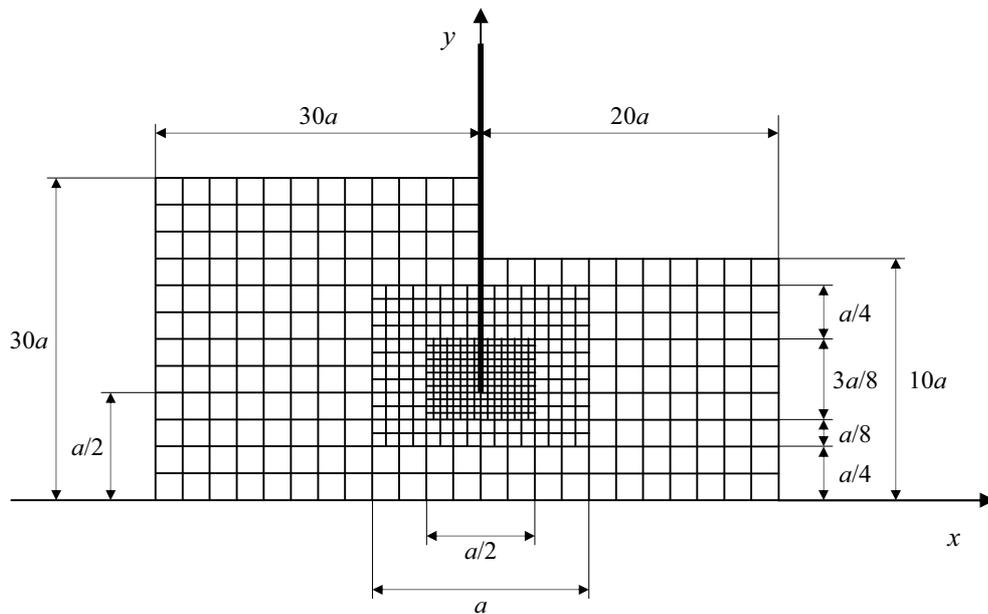


Figura 39: Grade de células utilizada na simulação do escoamento através da fenda.

O número de partículas utilizado nas simulações variou entre $30 \cdot 10^6$ e $36 \cdot 10^6$, número suficiente para manter algumas dezenas de partículas por célula. Algumas regiões com fatores de peso diferenciados são definidas devido ao fato de haver variação significativa de densidade ao longo do eixo x . Tais regiões são mostradas na Figura 40, onde o peso aumenta conforme a indicação da setas Assim, se uma partícula entra numa zona de maior peso, uma segunda partícula com as mesmas características é gerada, e o número de partículas reais por ela representada é dividida por dois, como ilustra a Figura 41. Se várias partículas saem de uma zona de maior peso para outra de menor peso, metade delas é retirada da simulação, e isso é feito estatisticamente: a probabilidade da partícula continuar na simulação é 50%, e o teste dessa continuidade é feito através da comparação deste valor como um número aleatório gerado entre 0 e 100%. A partícula que permanece passa a representar o dobro de partículas reais.

O incremento de tempo Δt utilizado em todos os cálculos é igual a $0.01a/v_0$. Simulações de teste mostram que o uso de um incremento de $0.002a/v_0$ ocasionam uma diferença numérica que não excede a 0.5%, conforme ilustra a tabela 4.

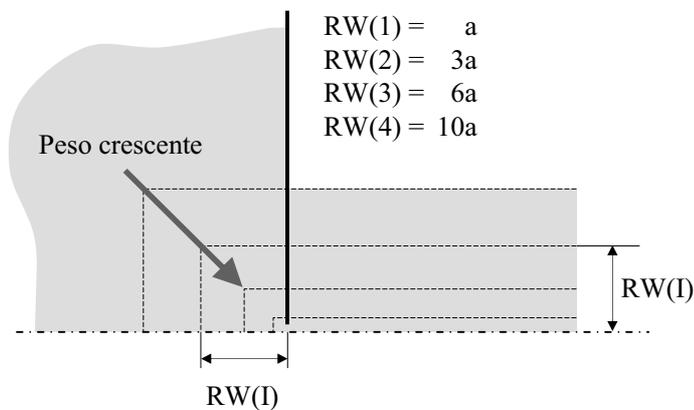


Figura 40: Divisão de zonas com pesos diferenciados na simulação do escoamento através da fenda.

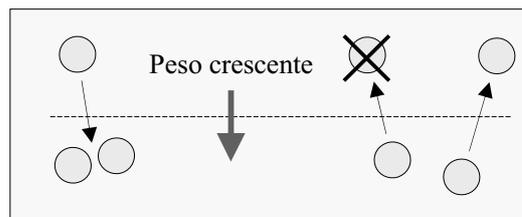


Figura 41: Mecanismo de duplicação e eliminação de partículas entre zonas de peso.

Tabela 4: Influência da variação do incremento de tempo Δt no fluxo de massa adimensional W através da fenda - $p_1/p_0 = 0$.

δ	$\Delta t = 0.01a/v_0$ (1)	$\Delta t = 0.002a/v_0$ (2)	$ (1)-(2) $
0.1	1.017	1.017	0.0%
1	1.129	1.129	0.0%
10	1.455	1.455	0.0%
100	1.545	1.547	0.1%
1000	1.534	1.533	0.1%

Uma discussão mais detalhada sobre a precisão numérica do cálculo do escoamento através da fenda pode ser encontrado no *Apêndice C – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento através da Fenda* (pág.181).

3.2.3 Critério de Amostragem

Conforme indicado na seção *Erro de Monte Carlo* (pág.69) através da equação (2.51), a flutuação da média, expressa pelo seu desvio padrão, é dada por

$$\bar{\sigma}_{\bar{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sigma_{n_i}. \quad (3.7)$$

Na equação (3.7), N é o tamanho da amostra e σ_{n_i} é uma constante, que para o caso do escoamento através da fenda, representa a flutuação estatística do valor de uma amostra do fluxo de massa adimensional, W . Esta flutuação é avaliada em função da quantidade de partículas que passam para a direita da fenda (direção à jusante), representada por n_f^+ , e da quantidade que passa para a esquerda da fenda (direção à montante), representada por n_f^- , durante o intervalo Δt (uma iteração). As flutuações estatísticas destas quantidades são da ordem de $\sqrt{n_f^+}$ e $\sqrt{n_f^-}$, respectivamente. Como W é calculado a partir da diferença $n_f^+ - n_f^-$, sua flutuação estatística relativa é da ordem de

$$\frac{\sqrt{n_f^+} + \sqrt{n_f^-}}{n_f^+ - n_f^-}, \quad (3.8)$$

a qual, considerando que $n_f^+ > n_f^-$ e que se está avaliando ordem de grandezas, pode ser simplificada para

$$\frac{\sqrt{n_f^+}}{n_f^+ - n_f^-}. \quad (3.9)$$

Como se está interessado na média W das amostras, então a flutuação estatística

relativa desta média, considerando a equação (3.7) e a expressão (3.9), é da ordem de

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\sqrt{n_f^+}}{n_f^+ - n_f^-} \quad (3.10)$$

ou

$$\frac{\sqrt{Nn_f^+}}{Nn_f^+ - Nn_f^-}. \quad (3.11)$$

Os valores Nn_f^+ e Nn_f^- representam a quantidade de partículas que passam pela fenda nas direções à jusante e à montante, respectivamente, ao longo de todo tempo de acumulação estatística, t . Assim, fazendo $N^+ = Nn_f^+$ e $N^- = Nn_f^-$, a flutuação estatística relativa da média do fluxo de massa adimensional W através da fenda ao longo da simulação é da ordem de

$$\frac{\sqrt{N^+}}{N^+ - N^-}. \quad (3.12)$$

Para os cálculos realizados neste trabalho, a amostragem dos resultados (W e campo de escoamento) foi realizada no momento em que se verificou

$$\frac{\sqrt{N^+}}{N^+ - N^-} < 0.001, \quad (3.13)$$

situação esta que garante uma precisão numérica inferior a 1%.

À medida que a razão de pressão p_1/p_0 aumenta, o valor de N^- aumenta e se aproxima do valor de N^+ , o que implica que o número de amostras N tem que aumentar significativamente para que a condição dada pela expressão (3.13) seja respeitada. Assim, a quantidade de amostras (iterações) para calcular o fluxo W para $p_1/p_0 = 0.5$ é cerca de 3 vezes maior do que para $p_1/p_0 = 0.0, 0.1$ (onde $N^+ \gg N^-$), e da ordem de 10 vezes maior para $p_1/p_0 = 0.9$. Por este motivo, neste trabalho a razão de pressão máxima foi limitada à $p_1/p_0 = 0.7$.

Utilizando-se o máximo da capacidade de memória dos computadores disponíveis para este trabalho, que permitiu simular da ordem de $30 \cdot 10^6$ partículas modelo, o tempo médio de simulação necessário para obter o fluxo W respeitando a condição dada pela expressão (3.13) foi cerca de 2 a 3 semanas para $p_1/p_0 = 0.0$, e cerca de 8 a 10 semanas para $p_1/p_0 = 0.7$.

Tabela 5: Fluxo adimensional de massa W versus parâmetro de rarefação δ e razão de pressão p_1/p_0 .

δ	W			
	$\frac{p_1}{p_0} = 0.$	0.1	0.5	0.7
0.02	1.006	0.905	0.505	0.305
0.05	1.011	0.912	0.507	0.308
0.1	1.024	0.923	0.520	0.315
0.2	1.042	0.944	0.539	0.329
0.5	1.088	0.993	0.579	0.355
1	1.148	1.060	0.640	0.397
2	1.234	1.165	0.752	0.477
3	1.294	1.244	0.851	0.552
5	1.381	1.349	1.015	0.690
10	1.479	1.467	1.237	0.940
20	1.541	1.531	1.344	1.098

δ	W			
	$\frac{p_1}{p_0} = 0.$	0.1	0.5	0.7
30	1.555	1.550	1.371	1.130
50	1.568	1.560	1.384	1.145
80	1.568	1.562	1.385	1.149
100	1.568	1.561	1.383	1.147
120	1.566	1.559	1.383	1.146
150	1.564	1.557	1.380	1.146
200	1.562	1.553	1.378	1.143
500	1.557	1.546	1.376	1.139
1000	1.552	1.545	1.374	1.141
2000	1.547	1.550	1.373	1.139

3.3 Resultados

3.3.1 Fluxo de Massa

Os valores numéricos obtidos para o fluxo de massa adimensional através da fenda são mostrados na Tabela 5 para $p_1/p_0 = 0, 0.1, 0.5$ e 0.7 e para $0.02 < \delta < 2000$ (regime de moléculas livres até regime hidrodinâmico). Resultados para $p_1/p_0 = 0$, que representa escoamento para o vácuo, foram publicados em artigo por Sharipov & Kozak [111] para a ampla faixa de rarefação considerando um domínio de escoamento menor. Porém, uma comparação dos resultados desse artigo com os dados da segunda coluna da Tabela 5 permite verificar que a diferença entre os respectivos resultados não excede 0.8%. O fluxo de massa e o campo de escoamento através da fenda no caso de escoamento para vácuo no regime de moléculas livres pode ser encontrado no trabalho de Wadsworth & Erwin [103].

No regime de moléculas livres ($\delta \rightarrow 0$) o valor numérico de W tende ao valor teórico previsto, $W = (1 - p_1/p_0)$. No regime hidrodinâmico ($\delta \rightarrow \infty$) o fluxo W também tende a um valor constante que depende da razão de pressão p_1/p_0 . Este comportamento é bem similar ao observado por Sharipov [75] para escoamento através de pequenos orifícios. Na Tabela 6 é possível comparar o fluxo W para fenda e orifício: os valores são muito próximos entre si. Em ambos os escoamentos - através de orifício e de fenda - observa-se um leve “pico” do fluxo de massa adimensional antes deste ficar constante. Tal comportamento ainda não teve sua razão esclarecida e é ainda objeto de estudo.

Tabela 6: Fluxo de massa adimensional W no limite $\delta \gg 1$ para fenda e orifício.

p_1/p_0	fenda	orifício
0	1.547	1.528
0.1	1.550	1.520
0.5	1.373	1.347

(Fonte: ref.[75].)

Tabela 7: Coeficientes para as equações (3.15) para $0 \leq p_1/p_0 \leq 0.7$.

j	1	2	3	4
$a_{1,j}$	0.1820	0.4290	-0.7414	0.5190
$a_{2,j}$	0.0060	-0.0094	0.0929	0.0119
$a_{3,j}$	0.0011	0.0339	0.0821	-0.1161
$a_{4,j}$	0.2570	-0.1469	-0.8057	0.7512
$a_{5,j}$	0.0020	0.0595	-0.0760	0.0075

Uma significativa variação do fluxo W ocorre no intervalo $0.5 < \delta < 50$ para todas as razões de pressão p_1/p_0 . A variação relativa do fluxo de massa adimensional do regime de moléculas livres para o hidrodinâmico é tanto maior quanto maior a razão de pressão. Enquanto o fluxo W no regime hidrodinâmico ($1 \ll \delta$) é cerca de 1.55 maior que o do regime de moléculas livres ($\delta \ll 1$) para $p_1/p_0 = 0$, este valor aumenta para 3.8 vezes para $p_1/p_0 = 0.7$.

Os valores numéricos da Tabela 5 são ajustados pela fórmula

$$W = \left(1 - \frac{p_1}{p_0}\right) \left(1 + \frac{A_1\delta - A_2\delta \ln(\delta) + A_3\delta^2}{1 + A_4\delta + A_5\delta^2}\right), \quad (3.14)$$

onde

$$A_i = \sum_{j=1}^4 a_{ij}(p_1/p_0)^{(j-1)}, \quad i = 1, \dots, 5. \quad (3.15)$$

Os valores dos coeficientes a_{ij} , obtidos por ajuste cúbico, são apresentados na Tabela 7. Para a interpolação nas razões de pressão tabeladas ($p_1/p_0 = 0, 0.1, 0.5$ e 0.7) o erro permanece na faixa dos 0.5% na maioria dos pontos, aumentando para pouco mais de 1% para $\delta = 0.2$ e 0.5 . Uma comparação dos dados numéricos com a curva de ajuste dada pela fórmula (3.14) pode ser vista na Figura 42, junto com a curva extrapolada para $p_1/p_0 = 0.3$.

Na mesma Figura 42 valores do fluxo W obtidos por Wadsworth & Erwin [103] para $p_1/p_0 = 0.02 \approx 0.0$ e $p_1/p_0 = 0.5$, e valores de Chung [104] e Sazhin [109], obtidos para

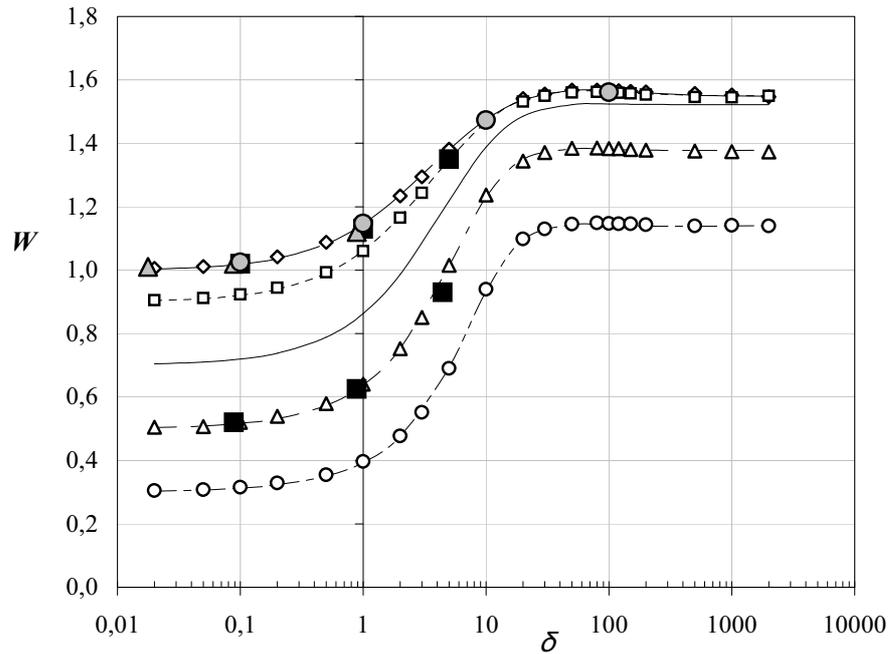


Figura 42: Pontos calculados e respectivas curvas de ajuste para o fluxo de massa adimensional W através da fenda.

Legenda

$p_1/p_0 = 0$ (\diamond), $p_1/p_0 = 0.1$ (\square), $p_1/p_0 = 0.5$ (\triangle) e $p_1/p_0 = 0.7$ (\circ);
 linha isolada: extrapolação para $p_1/p_0 = 0.3$, fórmula (3.14);
 quadrados negros - dados de Wadsworth & Erwin [103];
 triângulos cinzas - dados de Chung [104];
 círculos cinzas - dados de Sazhin [109].

$p_1/p_0 = 0.0$, são mostrados como símbolos cheios. É possível notar que estes valores tem boa concordância com os dados ajustados pela equação (3.14). Porém, referindo-se aos dados de Wadsworth & Erwin, para $\delta \approx 4.4$ existe uma discrepância em relação ao valor obtido usando a equação (3.14) de 2.6% e 4.6% para $p_1/p_0 = 0.01$ e $p_1/p_0 = 0.5$, respectivamente. Um fator que pode explicar essa diferença é a utilização de um número menor de partículas modelo no trabalho de Wadsworth & Erwin, cerca de 10^5 partículas, o que leva a um erro numérico maior do que o do presente trabalho.

3.3.2 Campo de Escoamento

3.3.2.1 Linhas de Corrente

As linhas de corrente para os vários valores de razão de pressão e de parâmetro de rarefação estão ilustradas na Figura 43. No *Apêndice D – Campo de Escoamento através*

da Fenda, seção *Linhas de Corrente* (pág.188), algumas das linhas de corrente que constam dessa figura são mostradas com mais detalhes.

Conforme esperado, nas proximidades do regime de moléculas livres ($\delta = 0.01$ e 0.1) os campos de escoamento são simétricos. Na região de transição entre o regime de moléculas livres e hidrodinâmico ($\delta = 1$ e 10) a simetria desaparece gradativamente, e na região do regime hidrodinâmico ($\delta = 100$ e 1000) o comportamento é completamente diverso, sendo a diferença mais evidente para razões de pressão maiores, onde a interação do fluxo proveniente da fenda com o gás situado no reservatório à jusante é mais intensa. Para $p_1/p_0 = 0.1$ e $\delta = 100$ e 1000 (início do regime contínuo) percebe-se que as linhas de corrente próximas ao eixo x após a fenda não são retilíneas, e sim apresentam um padrão que sugere um comportamento de expansão-compressão, resultado compatível com a dinâmica dos gases contínua (vide Shapiro [9]).

O que se pode deduzir desses conjuntos de gráficos é que, com o aumento da razão de pressão no regime de transição e, principalmente, hidrodinâmico, aumenta a interação entre as partículas do escoamento à jusante da fenda, como pode ser notado pelas linhas de corrente indicando regiões de recirculação, onde efeitos viscosos se fazem presentes. Quanto mais estreita a região de recirculação, maior a intensidade das interações e maiores os gradientes das propriedades do escoamento, mas o alcance da perturbação causada pelo escoamento através da fenda diminui (“amortecimento pela viscosidade”). Certamente isto está associado ao aumento de partículas presentes na região à jusante com o aumento da razão de pressão e diminuição da rarefação. Para razões de pressão menores e regime próximo ao de moléculas livres, o escoamento tende a se propagar com maior alcance e sem direção preferencial, visto que interações inter-moleculares praticamente inexistem para alterar as trajetórias das partículas provenientes da fenda.

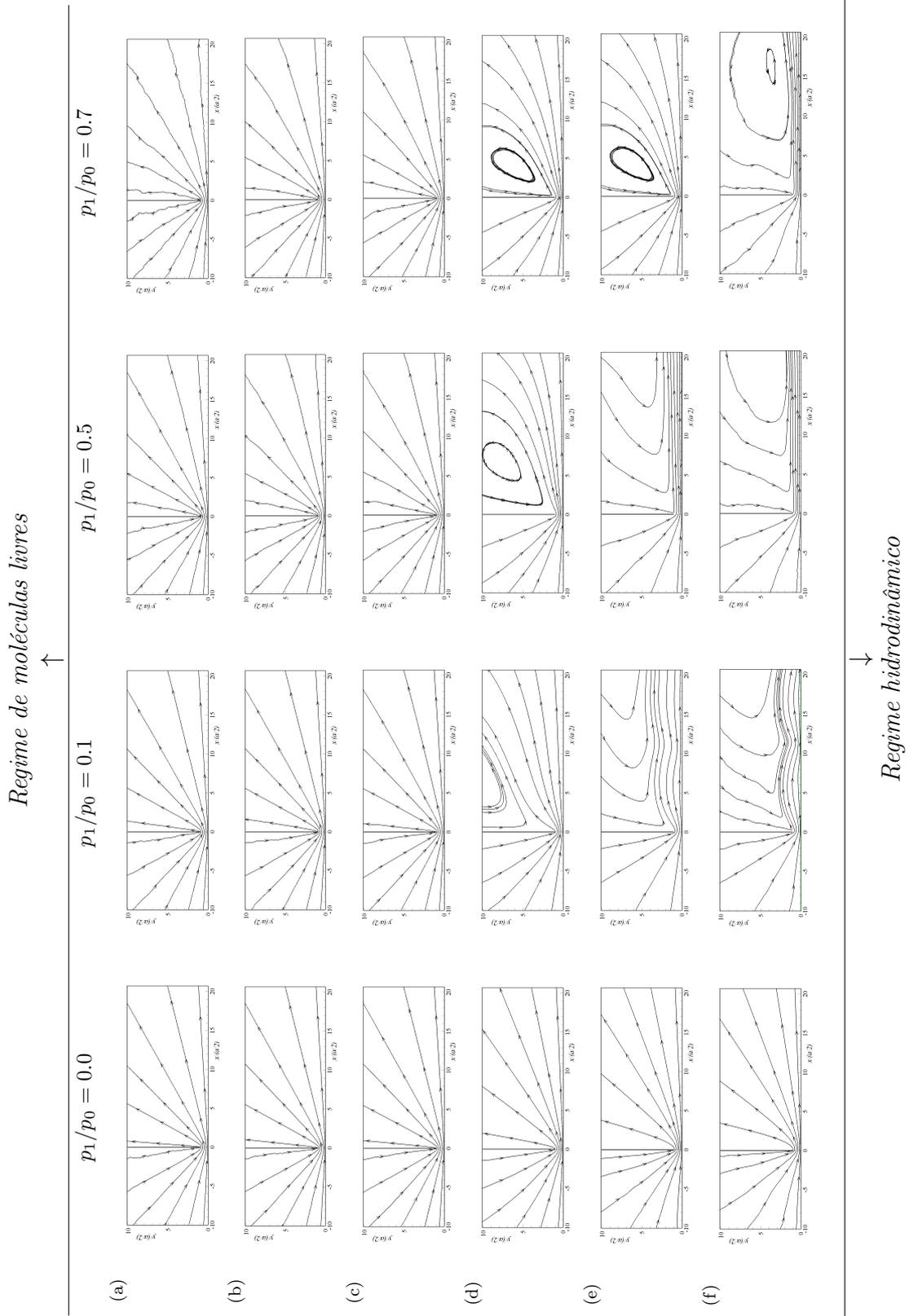


Figura 43: Evolução qualitativa das linhas de corrente do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$.

3.3.2.2 Propriedades ao Longo do Eixo de Simetria

As distribuições de densidade ρ , temperatura T e componente longitudinal da velocidade hidrodinâmica u_x ao longo do eixo de simetria x são apresentadas nas Figuras 44, 45, 46 e 47 para as razões de pressão $p_1/p_0 = 0, 0.1, 0.5$ e 0.7 , respectivamente.

Para as razões de pressão $p_1/p_0 = 0, 0.1$ e 0.5 , e $\delta = 0.1, 1$ e 10 , a densidade ρ decresce monotonicamente do valor ρ_0 para o valor $\rho_0(1 - p_1/p_0)$. Para as razões de pressão $p_1/p_0 = 0.1$ e 0.5 , $\delta = 0.1, 1$ e 10 observa-se que a temperatura possui um mínimo logo após a fenda, voltando a crescer em direção à temperatura de estagnação T_0 . Para $p_1/p_0 = 0.7$ tal comportamento também existe, porém é menos evidente devido à escala do gráfico, mantida constante para permitir uma melhor comparação entre as diversas razões de pressão. Na mesma posição longitudinal do mínimo de temperatura ocorre o máximo da velocidade u_x , a qual passa a decair na direção à jusante.

Embora nas Figuras 44 e 45 sejam mostradas variações significativas da temperatura ao longo do plano de simetria, o que sugeriria o abandono do modelo HS em prol do modelo VHS, resultados já apresentados na Tabela 3 para escoamento através de orifícios para as mesmas razões de pressão, qualitativamente muito semelhante ao escoamento através de fendas, mostram que não há diferença perceptível no valor do fluxo de massa adimensional adotando um ou outro modelo.

Para a razão de pressão $p_1/p_0 = 0.1$, $\delta = 100$ e 1000 , existe uma variação abrupta para a densidade ρ , temperatura T e velocidade u_x nas posições $x/(a/2) \approx 12, 22$ e 33 . No caso de escoamento axissimétrico, como o escoamento através de orifícios, tais variações abruptas indicam a presença do que se denomina discos de Mach, que surgem num sistema de choque-expansão [9], onde tais variações das propriedades ocorrem. No caso do escoamento através de fenda, refere-se a essas variações como cintos de Mach. As variações observadas são praticamente as mesmas que as reportadas por Sharipov [75] para orifícios.

O comportamento qualitativo da densidade, temperatura e velocidade longitudinal para todas as razões de pressão consideradas e $\delta = 0.1, 1$ e 10 são semelhantes entre si, diferindo apenas na intensidade da variação, que é maior para valores menores de p_1/p_0 . No regime hidrodinâmico, $\delta = 100$ e 1000 , todas as quantidades têm uma variação mais intensa na direção longitudinal ($|\partial/\partial x| \gg 1$) logo após a fenda.

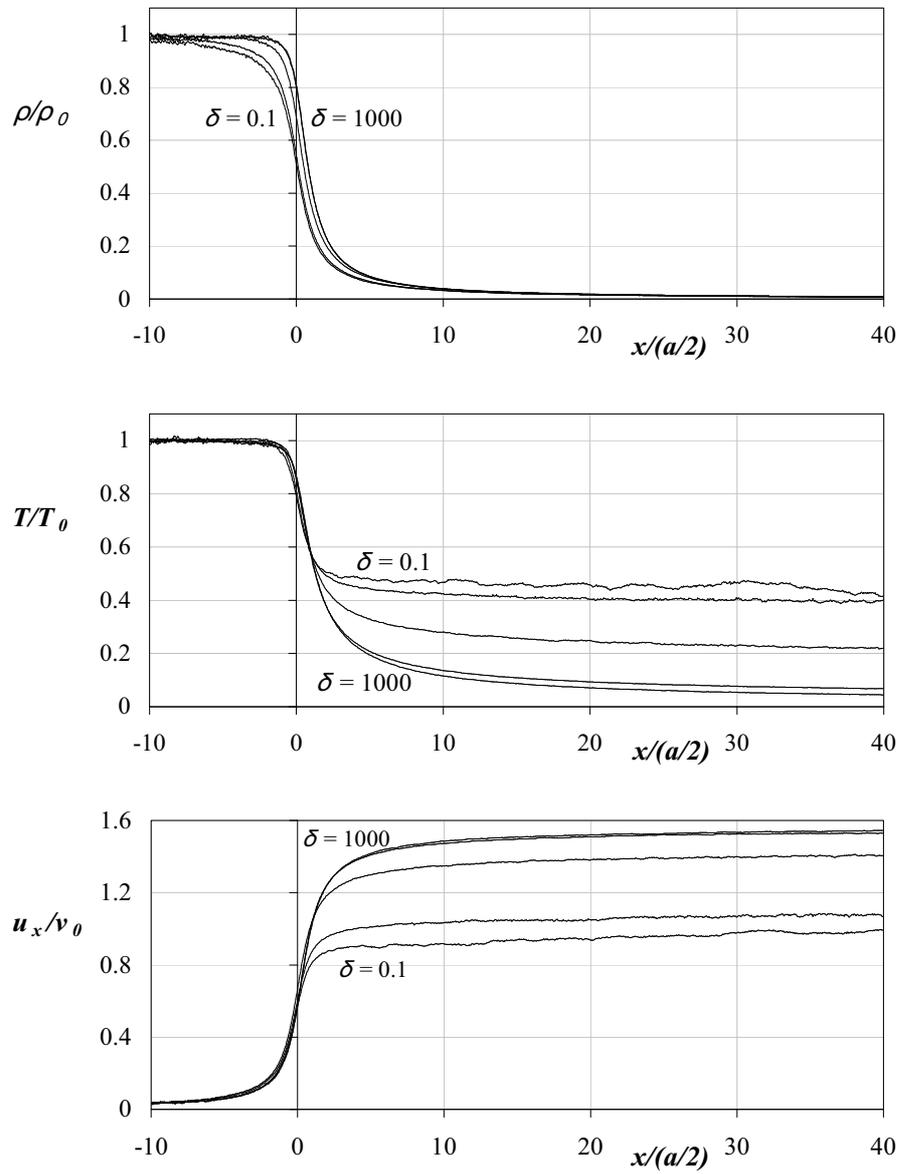


Figura 44: Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.0$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).

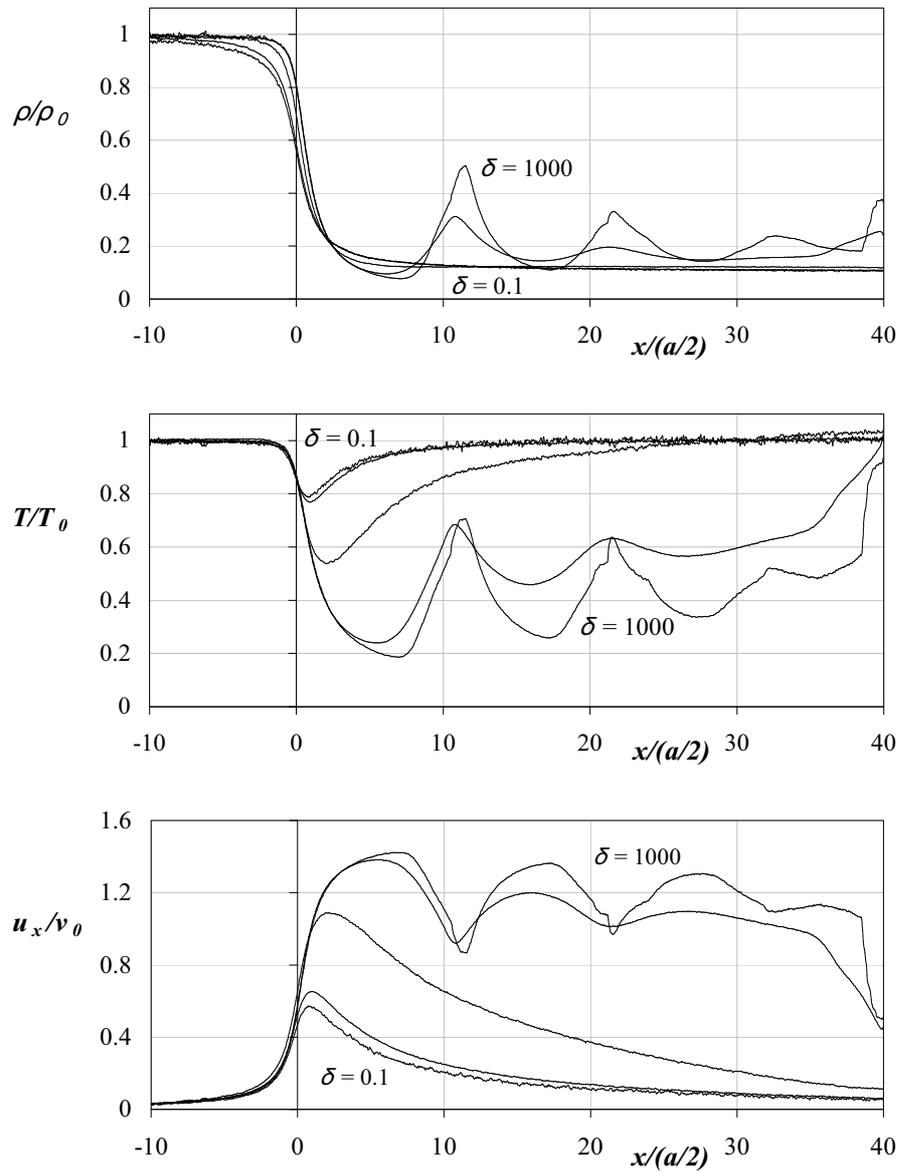


Figura 45: Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.1$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).

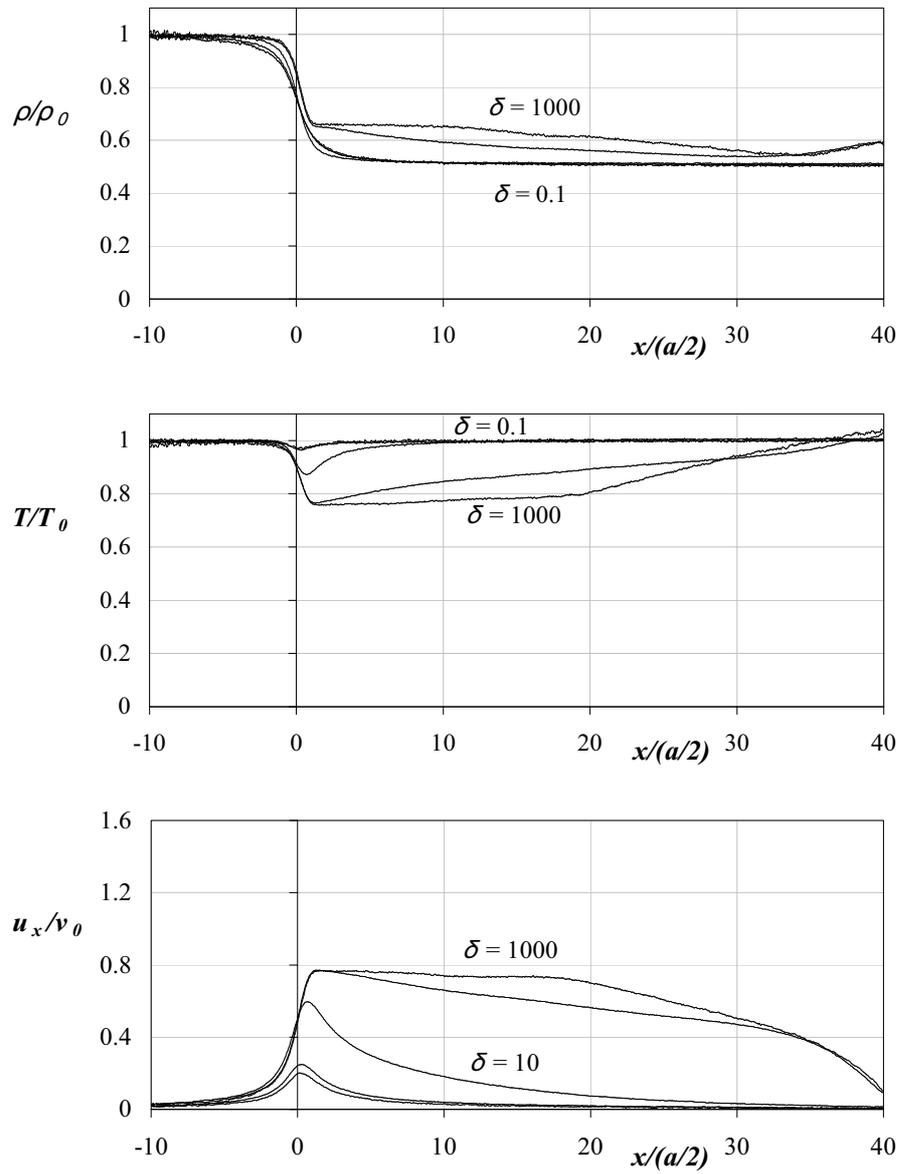


Figura 46: Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.5$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).

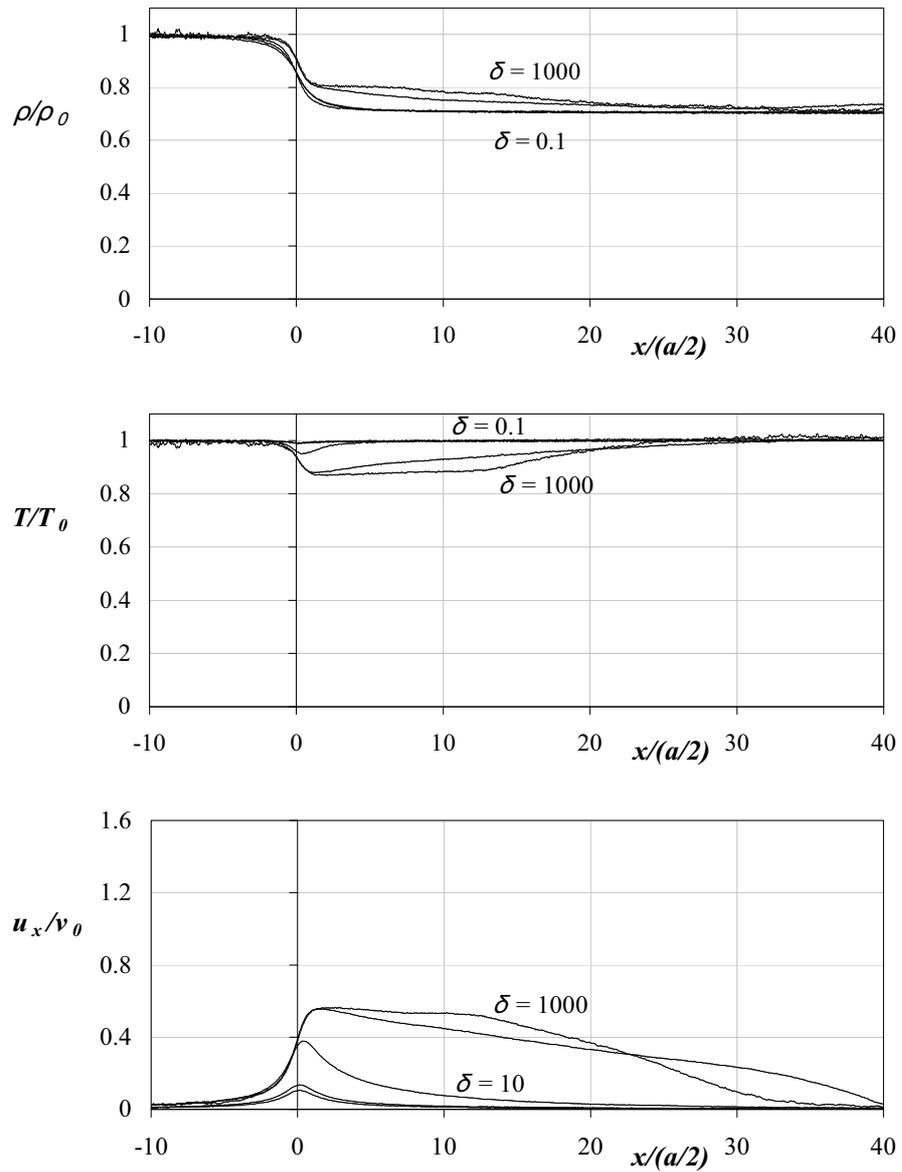


Figura 47: Distribuição de densidade, temperatura e velocidade longitudinal ao longo do plano de simetria para $p_1/p_0 = 0.7$ e $\delta = 0.1$ (≈ 0.01 , moléculas livres), 1, 10, 100 e 1000 (hidrodinâmico).

3.3.2.3 Distribuições de Densidade e Temperatura

Nas Figuras 48, 49, 50 e 51 a evolução dos campos de densidade e de temperatura são mostrados para $p_1/p_0 = 0, 0.1, 0.5$ e 0.7 junto com as linhas de corrente, permitindo observar a evolução qualitativa do escoamento do regime de moléculas livres para o regime hidrodinâmico para cada razão de pressão. Nas Figuras 52 e 53 os campos de densidade e temperatura, respectivamente, são mostrados para todos os valores de razão de pressão p_1/p_0 e do parâmetro de rarefação δ , possibilitando ter uma visão geral da mudança qualitativa do padrão de escoamento com a variação dos parâmetros que governam o escoamento.

O alcance da perturbação ocasionada pelo jato proveniente da fenda diminui com a diminuição da rarefação, visto que a interação do jato com o gás em repouso na região a jusante amortece o movimento das partículas. O mesmo acontece com o aumento da razão de pressão, que significa mais gás a jusante, e maior interação. Esta diminuição do alcance do jato é claramente observada pelo estreitamento da região perturbada nas figuras.

No *Apêndice D – Campo de Escoamento através da Fenda*, seções *Campo de Densidade* (pág.190) e *Campos de Temperatura* (pág.192), alguns dos campos de densidade e temperatura são apresentados com mais detalhes.

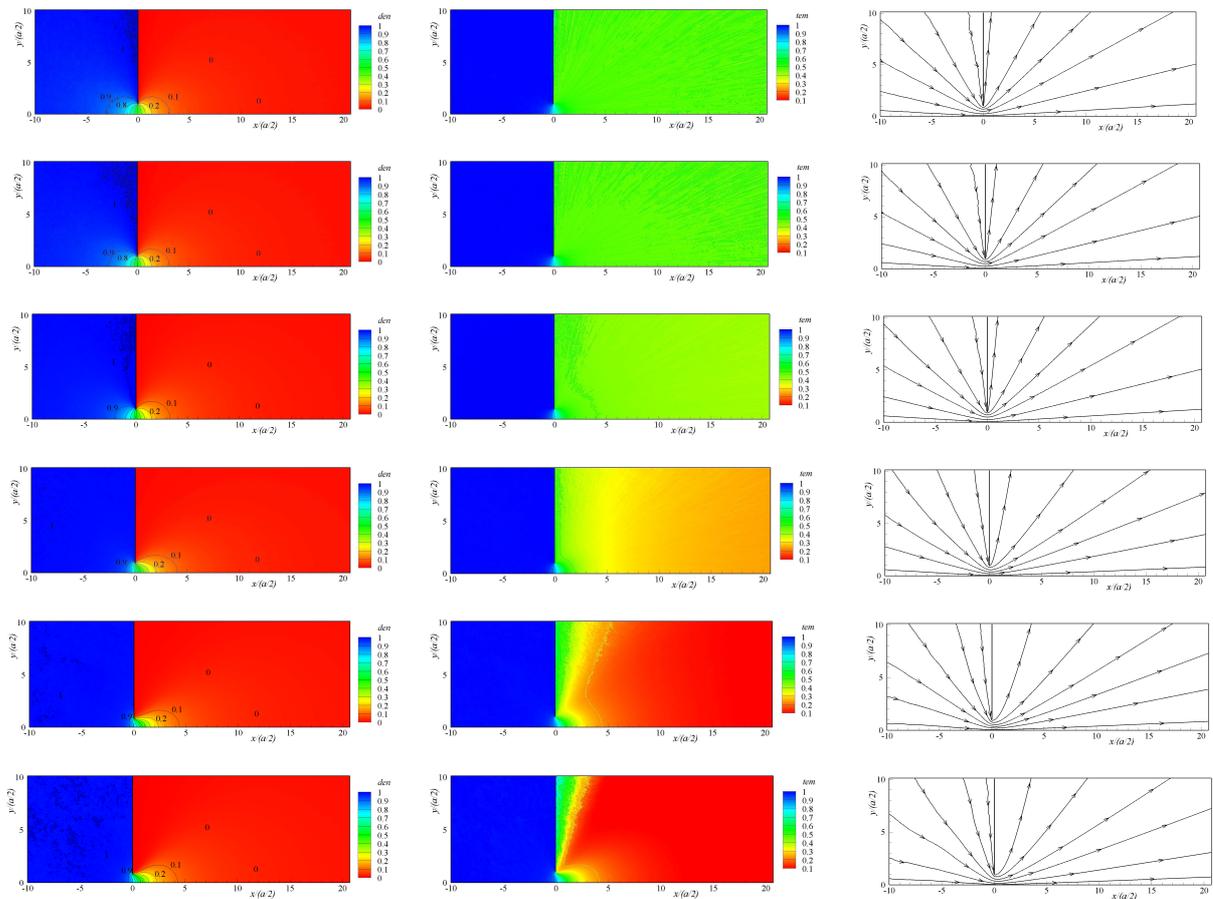
Regime de moléculas livres



Densidade

Temperatura

Linhas de corrente



Regime hidrodinâmico

Figura 48: Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.0$.

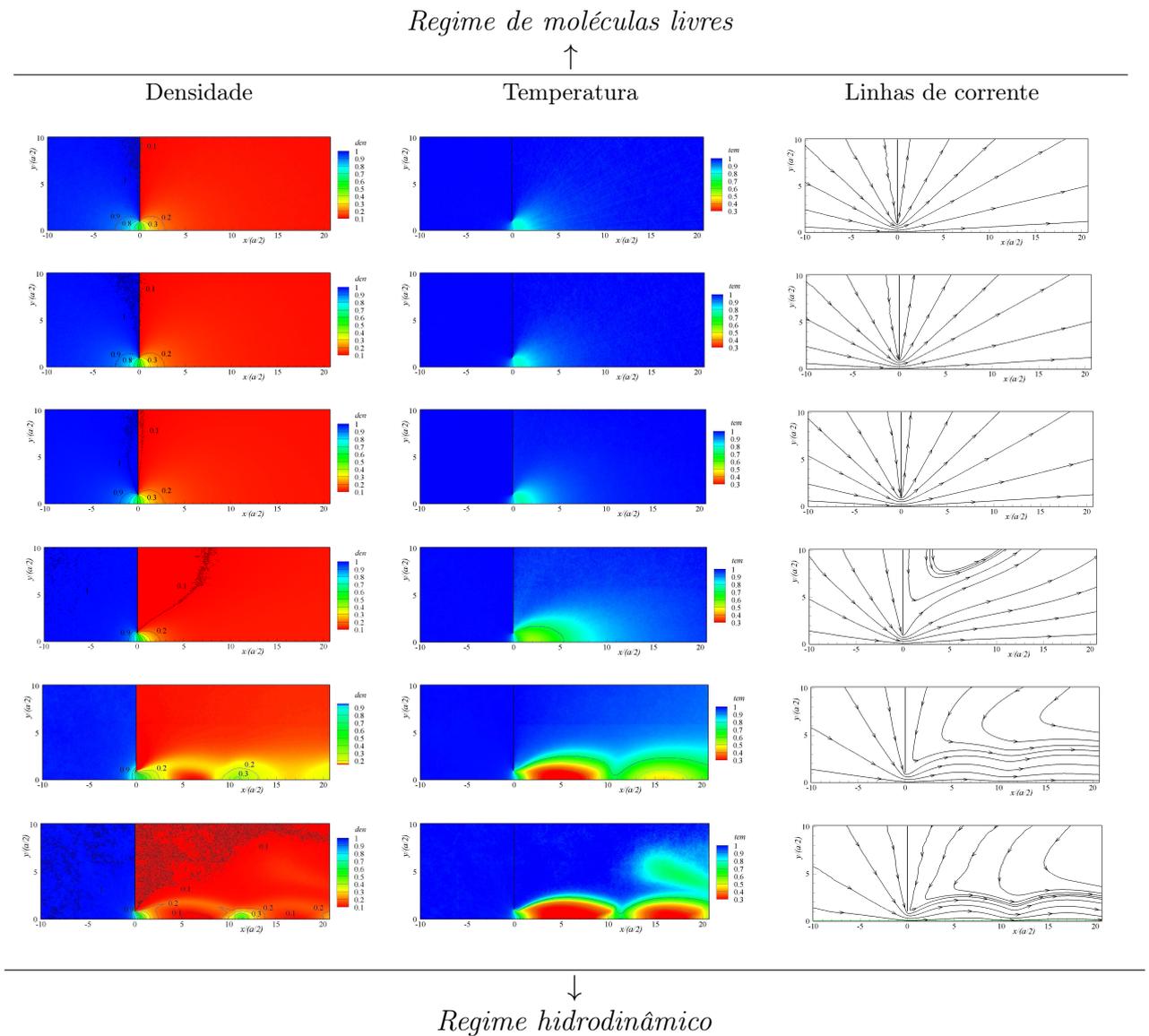


Figura 49: Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.1$.

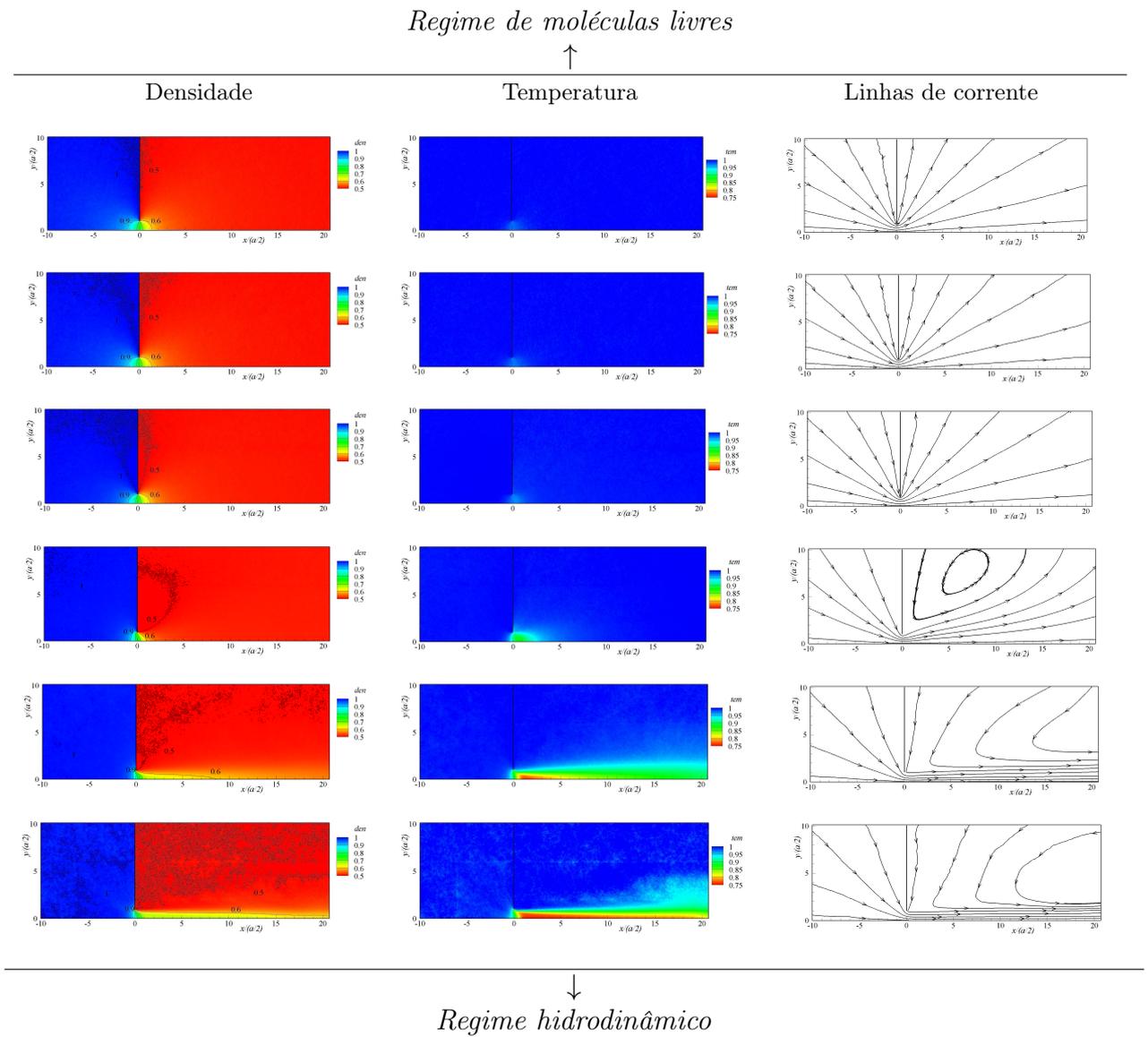


Figura 50: Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.5$.

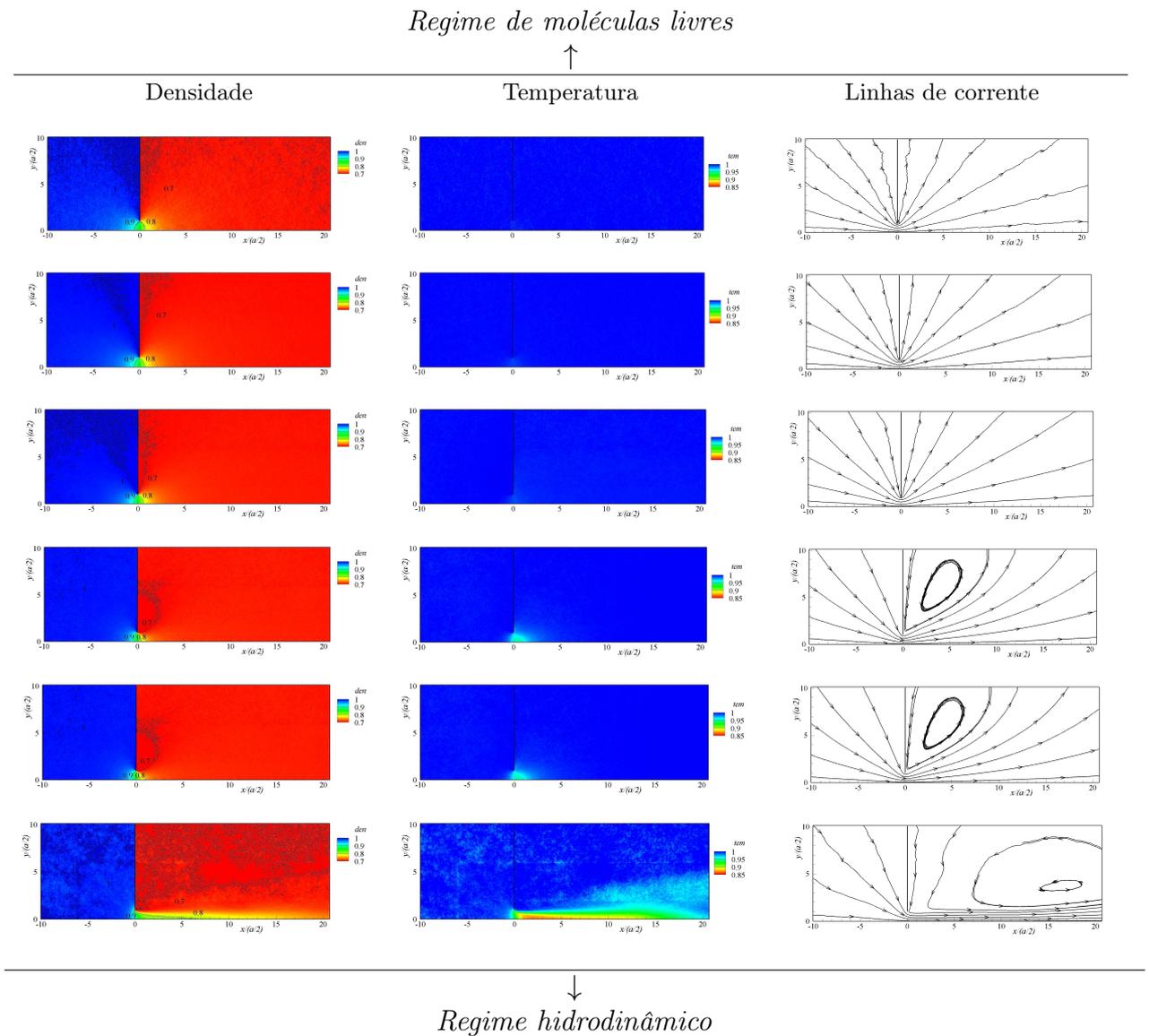


Figura 51: Evolução qualitativa dos campos de densidade e temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico - $p_1/p_0 = 0.7$.

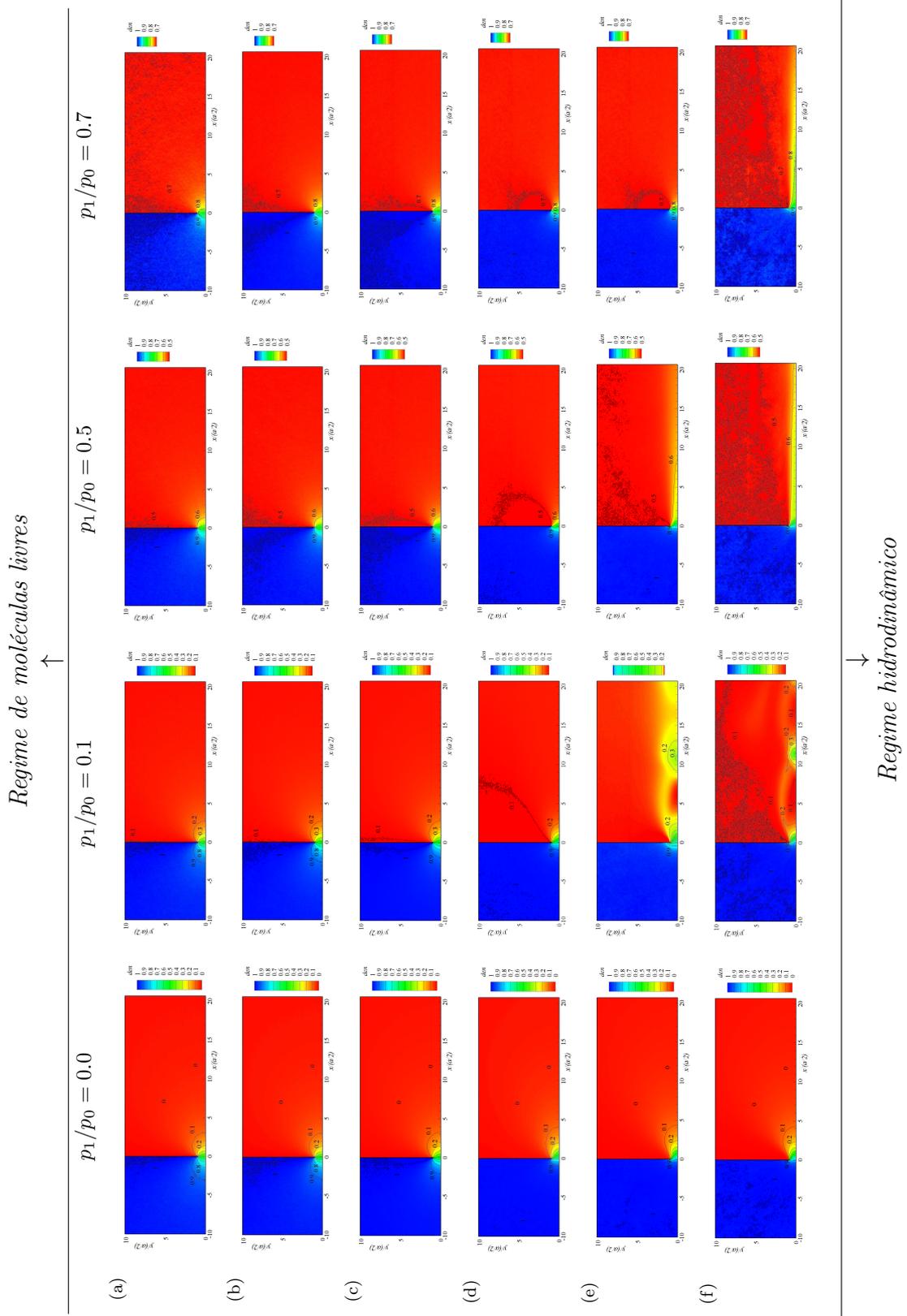


Figura 52: Evolução qualitativa do campo de densidade do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$.

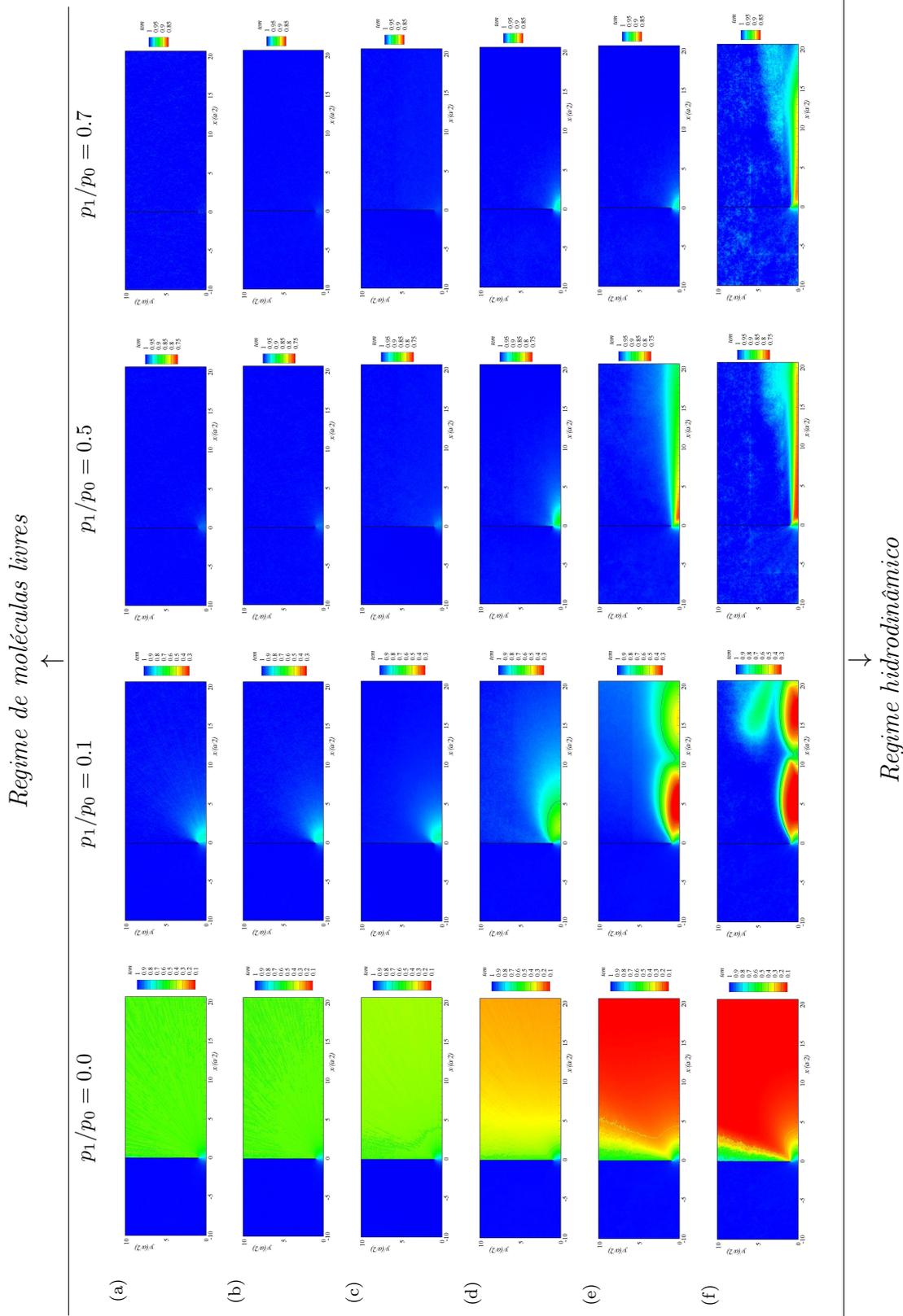


Figura 53: Evolução qualitativa do campo de temperatura do regime de moléculas livres ao regime hidrodinâmico para as várias razões de pressão: (a) $\delta = 0.01$; (b) $\delta = 0.1$; (c) $\delta = 1$; (d) $\delta = 10$; (e) $\delta = 100$; (f) $\delta = 1000$.

3.4 Comentários e Discussão

Neste capítulo o fluxo de massa através de uma fenda estreita foi calculado utilizando-se o método DSMC para vários valores de razão de pressão cobrindo uma ampla faixa de rarefação. O gás foi considerado como sendo monoatômico, o modelo de interação molecular utilizado foi o de esferas rígidas e a interação gás-superfície foi assumida como obedecendo o núcleo de espalhamento difuso. A razão de pressão variou desde o caso do escoamento para o vácuo até valores onde não há mais “entupimento”¹ do escoamento através da fenda ($0.5 \leq p_1/p_0 \leq 0.7$). Observou-se que, para qualquer razão de pressão, o fluxo de massa adimensional W tende a ser contante no regime de moléculas livres ($\delta < 0.5$) e no regime hidrodinâmico ($50 < \delta$, com um leve pico no início desse intervalo), passando por variação significativa entre estes dois limites ($0.5 < \delta < 50$).

Foram apresentadas as distribuições de densidade e temperatura, bem como as linhas de correntes, sendo que para $p_1/p_0 \approx 0.1$ foi possível identificar para o regime hidrodinâmico a formação dos cintos de Mach, comportamento característico para este tipo de escoamento, com uma formação de jato indicando um sistema de choque-expansão. Por fim, uma expressão analítica para o fluxo de massa adimensional W foi proposta cobrindo a ampla faixa de rarefação do gás e razões de pressão $p_1/p_0 \leq 0.7$. Esta expressão pode ser utilizada em problemas com geometria similar onde uma estimativa para o fluxo de massa seja necessária.

¹Entupimento é um termo da dinâmica dos gases utilizado para escoamento em um bocal de Laval, convergente-divergente, e ocorre quando a velocidade se torna sônica na seção de menor área, e o fluxo de massa passa a ser constante, mesmo que a razão de pressão diminua.

4 *Aerotermodinâmica de Satélite*

Este capítulo apresenta e discute os resultados para o cálculo aerotermodinâmico do satélite SARA considerando o gás como diatômico. O coeficiente de arrasto é calculado para vários níveis de rarefação do gás e para dois valores de número de Mach. Também os coeficientes de pressão, atrito e transferência de energia são calculados, e as visualizações dos campos de densidade, temperatura e número de Mach local, bem como das linhas de corrente, são apresentadas. Estes resultados são úteis para análise da proteção térmica do veículo. Uma fórmula de interpolação para o coeficiente de arrasto é proposta, a qual pode ser utilizada para cálculos de trajetória de reentrada do satélite.

4.1 Descrição do Problema

Conforme já abordado no Capítulo 1, *Introdução*, o projeto de um satélite retornável envolve três problemas relacionados com o escoamento de um gás rarefeito: (i) calcular a influência das camadas superiores da atmosfera na dinâmica de vôo do satélite em órbita baixa (força de arrasto), (ii) calcular o corredor de reentrada (trajetória de queda do satélite na superfície da Terra) e (iii) criar uma proteção térmica para o satélite (cálculo de fluxo de calor na superfície do satélite).

Nas camadas superiores da atmosfera a rarefação do ar é tão grande que o livre caminho médio das moléculas, LCM, tem a ordem de vários metros, podendo ser, portanto, da mesma ordem de grandeza, ou maior, que a dimensão característica do veículo. Nestas condições as equações da mecânica dos meios contínuos não são aplicáveis, e os métodos numéricos da dinâmica dos gases rarefeitos devem ser aplicados. Quando o satélite chega até as camadas inferiores da atmosfera a velocidade dele continua sendo grande, ou seja, hipersônica. Apesar do LCM ser muito pequeno nestas condições, a aplicação das equações da mecânica do contínuo pode ser muito complicada se forem considerados processos de dissociação e de recombinação das moléculas do gás. Além disso, num escoamento hipersônico a variação da densidade ao redor do satélite é tão grande que em algumas regiões o gás continua sendo rarefeito [142]. Nestas regiões o escoamento do gás também deve ser calculado com os métodos da dinâmica dos gases rarefeitos. Um dos métodos mais usados para o cálculo de escoamento de um gás rarefeito é a Simulação Direta de Monte Carlo, conforme já descrito na seção *Simulação Direta de Monte Carlo* (pág.76) do Capítulo 2, *Metodologia de Cálculo*.

Neste capítulo utiliza-se um código DSMC para calcular os coeficientes de arrasto, de pressão, de atrito e de transferência de energia, bem como o campo de escoamento, ao redor do satélite durante o vôo orbital e a reentrada na atmosfera considerando gás diatômico, que neste trabalho em particular é o gás nitrogênio, N_2 . Para tal, as interações entre as partículas do escoamento, e entre as partículas e a superfície do satélite, são tratadas de forma diferente do caso do gás ideal, onde o modelo de choque elástico é considerado: apenas intercâmbio de energia translacional ocorre. Para gases poliatômicos, outros modos de energia interna, como o rotacional e o vibracional, são intercambiados durante as interações, e o choque entre partículas, e entre partículas e a superfície, deixa de ser elástico. Tal intercâmbio de modos de energia interna é considerado no cálculo.

4.2 Processo de Solução

4.2.1 Parâmetros Determinantes do Escoamento

Seja o escoamento axi-simétrico de um gás ao redor do satélite onde a direção da velocidade do gás U_∞ longe do satélite coincide com seu eixo de simetria. A forma e o tamanho do satélite são mostrados na Figura 54.

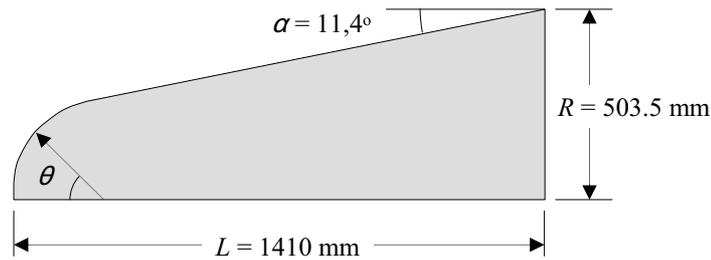


Figura 54: Forma e dimensões do SARA.

Denota-se a temperatura e a densidade do gás não perturbado, assumido caloricamente perfeito, como T_∞ e ρ_∞ , respectivamente. Sejam os seguintes parâmetros:

- (i). O número de Mach, definido como

$$\text{Ma} = \frac{U_\infty}{c}, \quad c = \sqrt{\gamma \frac{kT_\infty}{m}}, \quad (4.1)$$

onde k é a constante de Boltzmann, m é a massa molecular do gás, γ é a razão dos calores específicos e c é a velocidade do som no gás.

- (ii). O número de Reynolds, definido como

$$\text{Re} = \frac{RU_\infty\rho_\infty}{\mu_\infty}, \quad (4.2)$$

onde R é o raio maior do satélite, vide Figura 54, e μ é a viscosidade do gás na temperatura T_∞ .

A rarefação de um gás é caracterizada pelo número de Knudsen (Kn), definido neste caso como

$$\text{Kn} = \frac{\lambda_\infty}{R}, \quad (4.3)$$

onde λ_∞ é o caminho livre médio das moléculas que corresponde à temperatura T_∞ e à densidade ρ_∞ .

O parâmetro de rarefação, δ , para o caso do satélite é dado por

$$\delta = \frac{Rp_\infty}{\mu_\infty v_m}, \quad v_m = \sqrt{\frac{2kT_\infty}{m}}, \quad (4.4)$$

onde v_m é a velocidade molecular mais provável na temperatura T_∞ .

Com a mesma consideração realizada para o problema do escoamento através de fenda (razão $\mu v_m/p$ proporcional ao caminho livre médio das moléculas λ_∞), e considerando a relação (4.3), tomada para o escoamento não perturbado à montante (isotérmico, modelo HS aplicável), tem-se que

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\text{Kn}}. \quad (4.5)$$

Para pressões relativamente baixas, os gases se comportam como gases perfeitos [143], e assim vale a relação

$$p_\infty = \rho_\infty \frac{k}{m} T_\infty. \quad (4.6)$$

Utilizando as relações (4.1), (4.2), (4.5) e (4.6), o parâmetro de rarefação pode ser relacionado aos números de Mach e de Reynolds através da relação

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{2\gamma}} \frac{\text{Re}}{\text{Ma}}. \quad (4.7)$$

Das relações (4.5) e (4.7) consegue-se expressar o número de Knudsen como uma função dos números de Mach e de Reynolds, ou seja,

$$\text{Kn} = \sqrt{\gamma \frac{\pi}{2}} \frac{\text{Ma}}{\text{Re}}. \quad (4.8)$$

Observando-se as relações (4.7) e (4.8), nota-se que tanto o número de Knudsen como o parâmetro de rarefação não são variáveis independentes que determinam a solução do problema, mas sim o número de Reynolds e o Número de Mach são determinantes da solução. Assim, as quantidades macroscópicas são calculadas como função de dois parâmetros: o número de Mach, Ma , e o número de Reynolds, Re .

As quantidades macroscópicas calculadas são as seguintes:

- *Coefficiente de arrasto*

$$C_D = \frac{F}{p_d A}, \quad (4.9)$$

onde F é a força de arrasto,

$$p_d = \frac{1}{2} \rho_\infty U_\infty^2 \quad (4.10)$$

é a pressão dinâmica e

$$A = \pi R^2 \quad (4.11)$$

é a área frontal do satélite.

- *Coefficiente de transferência de energia*

$$C_h = \frac{q_n}{p_d U_\infty}, \quad (4.12)$$

onde q_n é fluxo de energia normal à superfície do satélite.

- *Coefficiente de pressão*

$$C_p = \frac{p - p_\infty}{p_d}, \quad (4.13)$$

onde p é a pressão normal à superfície de satélite, e p_∞ é calculado através da relação (4.6).

- *Coefficiente de atrito ou fricção*

$$C_f = \frac{\tau}{p_d}, \quad (4.14)$$

onde τ é a tensão tangencial à superfície do satélite.

Além dessas quantidades, visualizações dos campos de temperatura, densidade e velocidade (Mach local), bem como as linhas de corrente, são apresentados para os três regimes de rarefação (molécula livre, transição e hidrodinâmico) e para $Ma = 10$ e $Ma = 20$.

4.2.2 Hipóteses e Parâmetros da Simulação DSMC

Ao contrário do escoamento através da fenda, o escoamento em torno do satélite apresenta variação mais significativa de temperatura e, conforme mencionado na seção *Modelos de Colisão* (pág.89), o uso do modelo VHS é mais recomendado na análise da colisão, pois captura de forma mais realista a variação da viscosidade. Além disso, a fenomenologia da colisão diatômica é diferente do caso monoatômico, pois envolve o intercâmbio de outros modos de energia além do translacional. No caso de gás diatômico, conforme as hipóteses estabelecidas na seção *Etapa 3 - Colisões Intermoleculares* (pág.80), os modos translacional e rotacional estão envolvidos. Assim, é necessário adotar um modelo de troca de energia adequado, e o modelo utilizado é o de Larsen & Borgnakke, conforme já mencionado nessa mesma seção.

A interação partícula-superfície é considerada como obedecendo o núcleo de espalhamento difuso de Maxwell com total acomodação da temperatura, ou seja, a partícula

é refletida conforme a Maxwelliana na temperatura da superfície do satélite. Conforme mostra Bird [68], a energia rotacional (dois graus de liberdade para gás diatômico) de uma partícula de um gás à temperatura T_∞ obedece a uma distribuição tal que sua amostragem pode ser realizada conforme a expressão (2.71), ou seja,

$$E_r^{ref} = -\ln(R_f)kT_\infty. \quad (4.15)$$

Assim, multiplicando-se E_r , dado pela expressão acima, pelo fator T_s/T_∞ obtém-se a energia rotacional da partícula refletida.

Nas fronteiras abertas, a quantidade de partículas novas injetadas no escoamento é obtida utilizando-se a expressão (2.145), sendo $s = U_\infty/v_m$ para a fronteira esquerda, $s = -U_\infty/v_m$ para a fronteira direita e $s = 0$ para a fronteira superior, conforme a Figura 55. Assim, sendo N_E , N_D e N_S as quantidades de partículas que adentram o campo de escoamento pelas fronteiras esquerda, direita e superior, respectivamente, essas são calculadas usando a expressão

$$N_E = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}nv_m A_{fr}\Delta t \left\{ \exp \left[-\left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 \cos^2\theta \right] + \sqrt{\pi} \frac{U_\infty}{v_m} \cos\theta \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{U_\infty}{v_m} \cos\theta \right) \right] \right\} \quad (4.16)$$

para a fronteira esquerda,

$$N_D = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}nv_m A_{fr}\Delta t \left\{ \exp \left[-\left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 \cos^2\theta \right] - \sqrt{\pi} \frac{U_\infty}{v_m} \cos\theta \left[1 + \operatorname{erf} \left(-\frac{U_\infty}{v_m} \cos\theta \right) \right] \right\} \quad (4.17)$$

para a fronteira direita, e

$$N_S = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}nv_m A_{fr}\Delta t \quad (4.18)$$

para a fronteira superior.

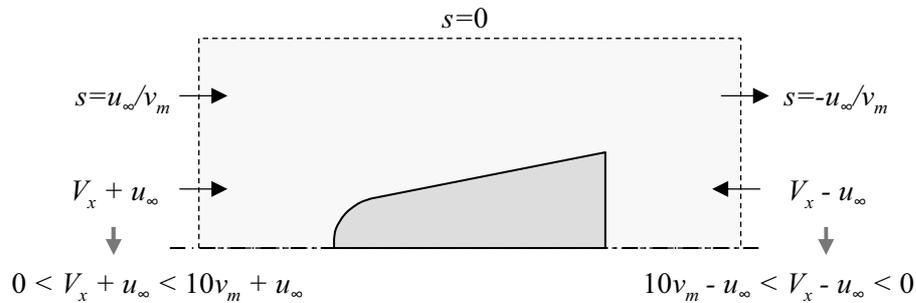


Figura 55: Parâmetro s_n e quantidade $(V_x \pm U_\infty)$.

A velocidade das partículas injetadas pela fronteira superior obedece à distribuição

Maxwelliana na temperatura da fronteira, T_∞ , uma vez que não existe componente da velocidade hidrodinâmica normal à superfície dessa fronteira. Para as outras fronteiras, essa componente existe, e nesse caso é necessário o uso do critério de aceitação/rejeição para atribuir a velocidade peculiar normal à superfície, $V_n (= V_x)$, usando a distribuição de probabilidade relativa dada pela expressão (2.150).

Assim, para a fronteira esquerda, a velocidade peculiar V_x é escolhida aleatoriamente utilizando-se a expressão (vide Figura 55)

$$V_x = (10 + U_\infty)R_f - U_\infty \quad (4.19)$$

e aceita se $P/P_{max} > R_f$, onde

$$\frac{P}{P_{max}} = \frac{2(\beta V_x + U_\infty/v_m)}{\sqrt{(U_\infty/v_m)^2 + 2} + U_\infty/v_m} \exp \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{U_\infty}{v_m} \left[\frac{U_\infty}{v_m} - \sqrt{\left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 + 2} \right] - \beta^2 \left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 \right\}. \quad (4.20)$$

Para a fronteira direita, a velocidade peculiar V_x é escolhida aleatoriamente utilizando-se a expressão (vide Figura 55)

$$V_x = (10 - U_\infty)R_f + U_\infty \quad (4.21)$$

e aceita se $P/P_{max} > R_f$, onde

$$\frac{P}{P_{max}} = \frac{2(\beta V_x - U_\infty/v_m)}{\sqrt{(U_\infty/v_m)^2 + 2} - U_\infty/v_m} \exp \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{U_\infty}{v_m} \left[\frac{U_\infty}{v_m} + \sqrt{\left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 + 2} \right] - \beta^2 \left(\frac{U_\infty}{v_m}\right)^2 \right\}. \quad (4.22)$$

As outras componentes tangentes às fronteiras, tanto esquerda como direita, são obtidas utilizando-se as expressões (2.69) e (2.70).

O esquema de células usado foi o de grades retangulares de níveis múltiplos. Este esquema é um aperfeiçoamento da grade retangular simples, que é de fácil implementação e de razoável eficiência computacional. A grade retangular simples apresenta algumas desvantagens, como no caso onde há grandes variações na densidade, ocorrendo um desbalanceamento na distribuição de partículas, pois algumas células terão um número de partículas muito maior que o número necessário, enquanto outras terão um número muito menor. Se os limites da superfície não forem retangulares, as células efetivas próximas desses limites serão irregulares. Além disso, como a estrutura da célula não está relacionada com a geometria da superfície, cada superfície diferente exige uma codificação

especial dentro do programa. Mesmo assim, escolheu-se o esquema de grade retangular multi-nível, o qual alivia algumas das desvantagens citadas acima pela utilização de células menores na região ao redor do satélite.

O escoamento é axialmente simétrico, e a região de interesse do escoamento do gás tem simetria cilíndrica com o raio do campo de escoamento igual a três raios do satélite, e o comprimento do campo é aproximadamente igual a três comprimentos do satélite, conforme mostra a Figura 56. As células na vizinhança do satélite possuem metade do tamanho daquelas afastadas do satélite. Um ponto importante que é considerado na simulação é a correção do volume da célula na fronteira com o satélite.

Utilizou-se na média $2 \cdot 10^6$ partículas modelo, sendo o tamanho das células maiores igual a $R/12$ e um incremento de tempo Δt dado pela expressão

$$\Delta t = 0.002R \left(\frac{m}{2kT_\infty} \right)^{1/2}. \quad (4.23)$$

Através dos testes para os quais o número de partículas foi dobrado, e o tamanho das células e o incremento do tempo divididos por dois, verificou-se que os parâmetros escolhidos garantem a incerteza numérica do coeficiente de arrasto na faixa de 1%.

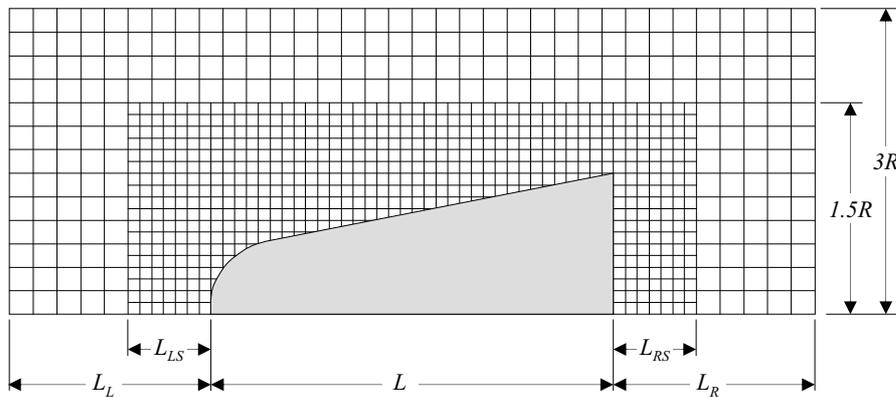


Figura 56: Esquema de células utilizado na simulação do escoamento em torno do SARA.

No *Apêndice E – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento ao redor do Satélite* (pág.194) é feita uma análise mais detalhada da influência dos parâmetros utilizados na simulação numérica, e sua influência nos resultados aqui obtidos.

4.2.3 Cálculo das Grandezas Macroscópicas

As propriedades macroscópicas podem ser identificadas pelos valores médios das quantidades moleculares apropriadas em qualquer local do escoamento, desde que haja um número suficiente de partículas dentro de uma célula. Pode-se obter as propriedades macroscópicas de interesse após um tempo de cálculo grande o suficiente para que o escoamento tenha se estabelecido, isto é, tenha se tornado estacionário e as flutuações minimizadas.

As fórmulas de cálculo da densidade ρ , da velocidade hidrodinâmica \mathbf{u} e da temperatura T já foram apresentadas na seção *Etapa 4 - Cálculo das Grandezas Macroscópicas* (pág.87). Quanto ao fluxo de calor, esse será uma parcela do fluxo de energia normal à superfície do satélite, \mathbf{q}_n , cujo cálculo é mostrado a seguir. Para uma análise (conservativa) da proteção térmica, o fluxo de energia pode ser considerado como sendo um valor limite para o fluxo de calor.

Para cálculo dos coeficientes de arrasto, C_D , de transferência de energia, C_h , de pressão, C_p , e de atrito, C_f , a superfície do corpo é dividida em segmentos de área A_s , e os valores desses coeficientes são obtidos através do número de partículas N_s que colidem com cada segmento.

Assim, para o coeficiente de arrasto, definido pela expressão (4.9), tem-se

$$C_D = \frac{1}{p_d \pi R_s^2} \frac{1}{t} \sum_{i=1}^{N_{s,total}} m(v_{xi}^{inc} - v_{xi}^{ref}), \quad (4.24)$$

onde v_{xi}^{inc} é a componente na direção x da velocidade da partícula incidente na superfície, v_{xi}^{ref} é a componente na direção x da velocidade da partícula refletida da superfície e $N_{s,total}$ é o número total de colisões durante o intervalo de tempo t .

Para o coeficiente de transferência de energia, dado pela expressão (4.12), obtém-se

$$C_h = \frac{1}{p_d U_\infty} \frac{1}{A_s t} \sum_{i=1}^{N_s} \left[\frac{m(v_i^{ref})^2}{2} - \frac{m(v_i^{inc})^2}{2} + E_{r_i}^{ref} - E_{r_i}^{inc} \right], \quad (4.25)$$

onde v_i^{inc} é o módulo da velocidade da partícula incidente na superfície, v_i^{ref} é o módulo da velocidade da partícula refletida da superfície, $E_{r_i}^{inc}$ é a energia rotacional da partícula incidente na superfície, $E_{r_i}^{ref}$ é a energia rotacional da partícula refletida da superfície, e t é o tempo de acumulação estatística.

Para o coeficiente de pressão, definido pela expressão (4.13), tem-se

$$C_p = \frac{1}{p_d} \left[\frac{1}{A_{st}} \sum_{i=1}^{N_s} m(v_{ni}^{ref} - v_{ni}^{inc}) - p_\infty \right], \quad (4.26)$$

onde v_{ni}^{inc} é a componente normal da velocidade da partícula incidente na superfície, e v_{ni}^{ref} é a componente normal da velocidade da partícula refletida da superfície.

Para o coeficiente de atrito ou fricção, definido pela expressão (4.14), tem-se

$$C_f = \frac{1}{p_d} \frac{1}{A_{st}} \sum_{i=1}^{N_s} m(v_{ti}^{ref} - v_{ti}^{inc}), \quad (4.27)$$

onde v_{ti}^{inc} é a componente tangencial da velocidade da partícula incidente na superfície, e v_{ti}^{ref} é a componente tangencial da velocidade da partícula refletida da superfície.

4.2.4 Critério de Amostragem

Na simulação do escoamento em torno do satélite, o parâmetro utilizado para definir o momento em que os resultados dos cálculos podem ser considerados satisfatórios é a variação relativa do coeficiente de arrasto. Após passado um período inicial de simulação, onde é dado tempo computacional suficiente para o escoamento se aproximar de uma situação de regime estacionário, a variação do coeficiente de arrasto é computada a cada iteração (C_D é uma média temporal), e a simulação pode ser considerada encerrada quando

$$\frac{(\Delta C_D)_k}{(C_D)_k} < 0.01\%, \quad (4.28)$$

onde $(\Delta C_D)_k$ é o módulo da diferença entre dois valores consecutivos do coeficiente de arrasto, ou seja, $|(C_D)_k - (C_D)_{k-1}|$.

4.3 Resultados

4.3.1 Observações gerais

Os cálculos numéricos de escoamento ao redor do satélite foram realizados para vários valores do número de Reynolds (Re) no intervalo de 0.1 a 10000. Dois valores do número de Mach (Ma) foram considerados: 10 e 20. Assim, de acordo com a expressão (4.8), o número de Knudsen (Kn) varia no intervalo de 0.01 a 300, ou seja, do regime hidrodinâmico ao regime de moléculas livres, abrangidos neste trabalho. Estes intervalos dos números de

Tabela 8: Parâmetros alterados na simulação considerando gás monoatômico e gás diatômico.

Gás	Monoatômico	Diatômico (N ₂)
γ	5/3	7/5
ω	0.50	0.74
X_{inel}	0.0	0.2
Modelo de interação molecular	HS	VHS

Mach e de Reynolds certamente abrangem os intervalos de variação dos mesmos durante a reentrada do satélite na atmosfera.

Como durante a sua queda o satélite sofre um forte aquecimento, é necessário fazer uma estimativa da influência da temperatura da superfície do satélite, T_s , em suas características aerodinâmicas. Para avaliar esta influência, os cálculos foram realizados para dois valores da razão de temperatura T_s/T_∞ : 1 e 10. O primeiro valor corresponde à situação em que a temperatura do satélite T_s é igual à temperatura do gás não perturbado, T_∞ , quando o satélite é denominado de "frio". O segundo valor, $T_s/T_\infty = 10$, corresponde à situação em que o satélite está significativamente aquecido em comparação ao gás não perturbado. Nesta situação o satélite é denominado de "aquecido". Na realidade, existem situações intermediárias; assim, considerando os dois valores extremos da temperatura do satélite podemos ter uma noção da ordem de grandeza da influência da mesma nas características aerodinâmicas.

Para avaliar a influência da hipótese de gás monoatômico (ideal) e diatômico (N₂), simulações foram realizadas para os dois casos. Basicamente, o que variou de um caso para outro foram três parâmetros, conforme mostrado na Tabela 8. O parâmetro γ é a razão entre os calores específicos do gás, o parâmetro ω é o expoente da lei da viscosidade (vide expressão (2.86)) e X_{inel} é o parâmetro que define a fração das colisões que são inelásticas numa iteração (vide expressão (2.102)). Recordando, este último parâmetro é a forma utilizada computacionalmente para representar o chamado de tempo de relaxação: existe uma "atraso" no intercâmbio de energia entre o modo translacional e o modo rotacional.

A seguir os resultados para gás diatômico são apresentados em forma gráfica. Os resultados numéricos para gás monoatômico estão inclusos numa próxima seção junto com os resultados numéricos para gás diatômico.

4.3.2 Coeficiente de Arrasto

O coeficiente de arrasto C_D , definido pela expressão (4.9), é apresentado na Figura 57 em função do número de Reynolds, Re , do número de Mach, Ma , e da temperatura do satélite, T_s . Pode-se observar que a dependência de C_D em relação ao número de Mach é fraca (a grosso modo, varia cerca de $\pm 10\%$ em torno de uma curva média). Ao mesmo tempo, a dependência em relação ao número de Reynolds é significativa quando há transição entre o regime de moléculas livres e o regime hidrodinâmico. Essa maior variação de C_D ocorre no intervalo $1 < Re < 1000$, no qual também ocorre a inversão das curvas, ou seja, para $Re < 2$ os valores de C_D para $Ma = 20$ se tornam maiores do que para $Ma = 10$, ocorrendo o contrário para $Re > 2$. Para o satélite “aquecido” esta inversão ocorre para $Re = 10$.

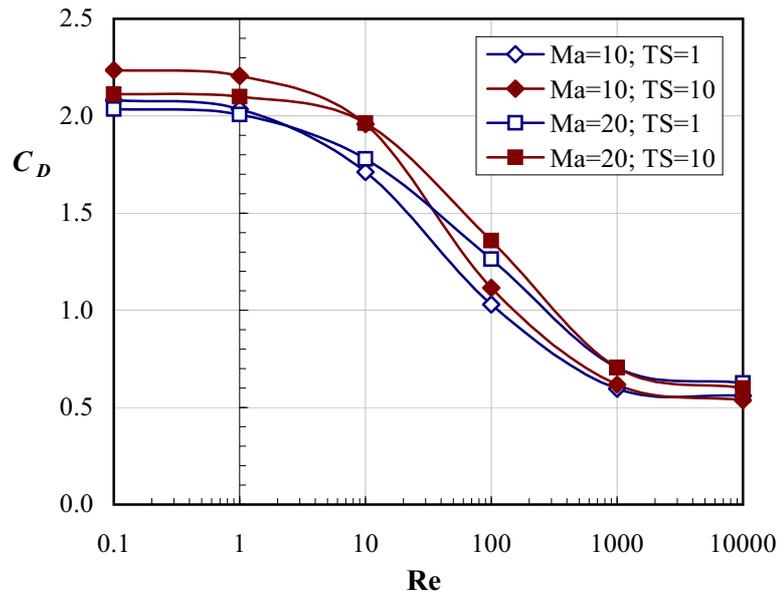


Figura 57: Coeficiente de arrasto do satélite SARA.

Uma análise dos valores numéricos de C_D para o satélite “frio” ($T_s/T_\infty = 1$) e para o “aquecido” ($T_s/T_\infty = 10$) mostra que a influência mais significativa da temperatura do satélite T_s no valor do coeficiente de arrasto C_D ocorre no regime de transição, entre $Re = 1$ e $Re = 100$, quando comparada aos regimes de moléculas livres e hidrodinâmico. Mesmo assim, para um mesmo número de Mach, esta influência é pequena ($\Delta C_D < 10\%$ em praticamente toda a curva).

Em uma primeira aproximação, desprezando os efeitos da temperatura da superfície do

satélite (T_s) e do número de Mach (Ma) no coeficiente de arrasto (C_D), que são pequenos, foi realizado o ajuste de curva mostrado na Figura 58, e cuja expressão analítica é dada por

$$C_D = \frac{1.572}{1 + 0.02568 e^{(2.031 \log Re)}} + 0.5493. \quad (4.29)$$

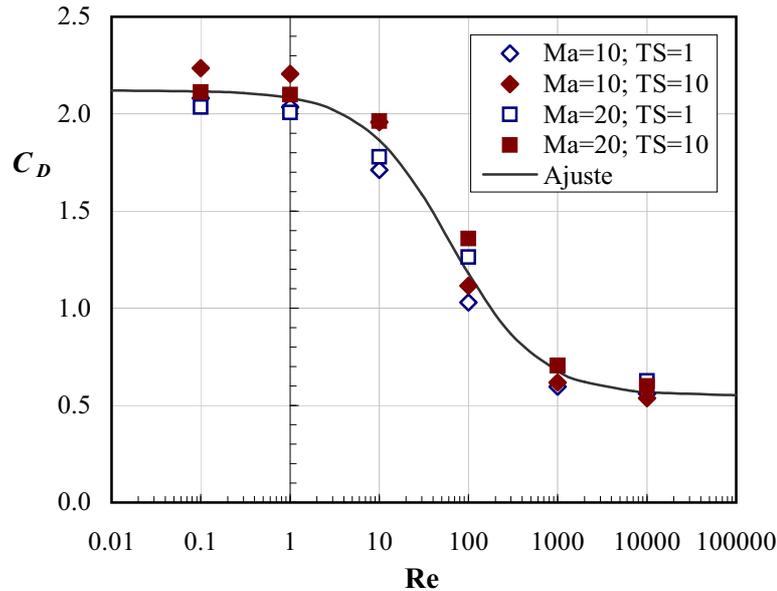


Figura 58: Ajuste do coeficiente de arrasto do satélite SARA conforme expressão (4.29).

4.3.3 Coeficiente de Pressão

Os resultados para o coeficiente de pressão C_p são apresentados na Figura 59 em função do ângulo θ ($0 < \theta < 1.3 \text{ rad} \approx 75^\circ$; vide Figura 54), do número de Mach e da temperatura do satélite. O que se observa nessa figura é que existe uma dependência relativamente fraca de C_p em relação aos números de Reynolds e de Mach para o satélite “frio” ($\Delta C_p < 20\%$ para variação do número de Reynolds, e $\Delta C_p < 10\%$ para a variação do número de Mach). Esta influência praticamente dobra para o satélite “aquecido”. Observando mais de perto, a influência da temperatura do satélite em C_p é praticamente desprezível no regime hidrodinâmico ($Re = 10000$) para todos os valores do número de Mach. No regime de moléculas livres ($Re = 0.1$) a temperatura do satélite afeta pouco o valor de C_p para alto número de Mach ($Ma = 20$) e afeta de forma mais significativa para número de Mach baixo ($Ma = 10$). O máximo valor de C_p está na parte da frente do satélite ($\theta \approx 0$; ponto de estagnação).

Na Figura 60 é mostrada uma comparação entre o coeficiente de pressão na ponta

da ogiva satélite calculado neste trabalho e o valor previsto pela teoria Newtoniana para regime de moléculas livres [6], dado por

$$C_p = 2\text{sen}^2\theta. \quad (4.30)$$

Observando esta figura é possível notar a boa concordância entre as duas curvas, particularmente para $\text{Ma} = 20$, uma vez que a expressão (4.30) apresenta resultados melhores para $\text{Ma} \rightarrow \infty$.

4.3.4 Coeficiente de Atrito

Na Figura 61 é apresentado o coeficiente de atrito C_f em função do ângulo θ para números de Mach 10 e 20. Os efeitos da rarefação podem ser observados comparando os resultados para diferentes números de Reynolds (Re). Ocorre um aumento significativo do valor do coeficiente C_f com a diminuição do número de Reynolds, indicando uma grande sensibilidade do coeficiente C_f em relação ao grau de rarefação do gás. Não há grande sensibilidade do coeficiente C_f em relação ao número de Mach (Ma) no regime de moléculas livres ($\text{Re} = 0.1$ e 1), mas isso muda com a diminuição da rarefação, sendo significativa a influência do número de Mach no regime hidrodinâmico ($\text{Re} \geq 1000$). Nos regimes de moléculas livres e de transição a temperatura do satélite praticamente não afeta o coeficiente C_f . Existe uma influência relativamente fraca da temperatura no regime hidrodinâmico ($\Delta C_f < 15\%$). O máximo valor do coeficiente C_f ocorre nas vizinhanças de $\theta = \pi/4$ (≈ 0.8).

4.3.5 Coeficiente de Transferência de Energia

As distribuições do coeficiente de transferência de energia C_h em função do ângulo θ são apresentadas na Figura 62 para Ma igual a 10 e 20 para os dois casos: satélite “frio”, ($T_s/T_\infty = 1$) e satélite “aquecido”, ($T_s/T_\infty = 10$). Pode-se observar a grande sensibilidade do coeficiente C_h em relação ao número de Reynolds, sendo que o coeficiente aumenta quando Re diminuiu, ou seja, quando o grau de rarefação aumenta. Ao mesmo tempo, para o satélite “frio”, a dependência do C_h em relação ao número de Mach é relativamente fraca ($\Delta C_h < 15\%$), mas para o satélite “aquecido”, ela é mais significativa. O máximo valor do coeficiente C_h ocorre no ponto da frente do satélite ($\theta = 0$), onde ocorre o maior aquecimento cinético devido à desaceleração do escoamento (ponto de estagnação). Observando os gráficos nota-se que para o número de Mach alto ($\text{Ma} = 20$) a influência

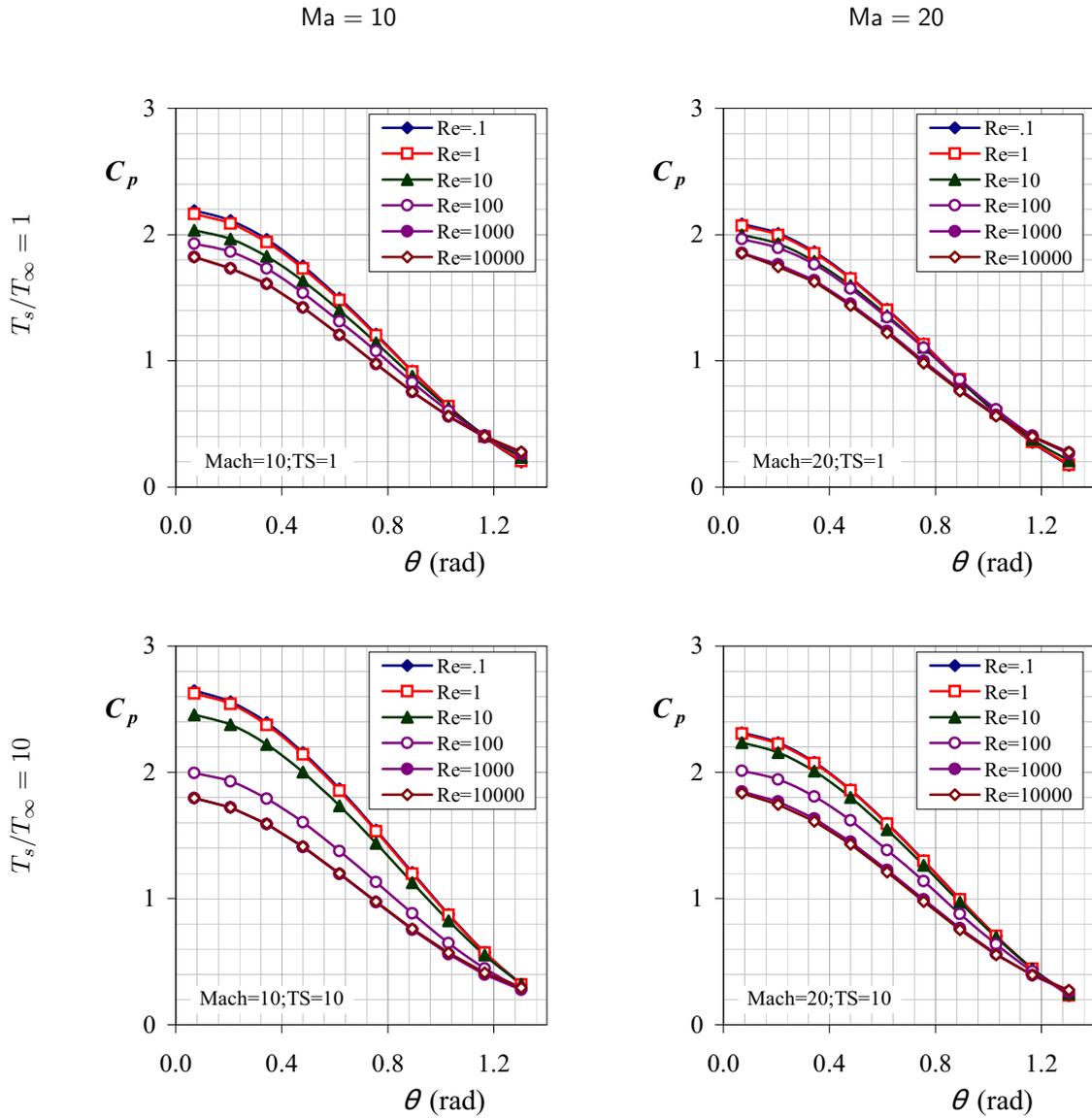


Figura 59: Coeficiente de pressão na ponta da ogiva do satélite.

da temperatura do satélite no coeficiente C_h é menor do que para número de Mach baixo ($Ma = 10$), onde a influência é mais significativa. Porém, para ambos números de Mach o valor de C_h diminui com o aumento da temperatura, o que é de se esperar, pois as diferenças de temperaturas entre o escoamento e superfície do satélite são menores no caso do satélite “aquecido”, o que implica em menor troca de energia.

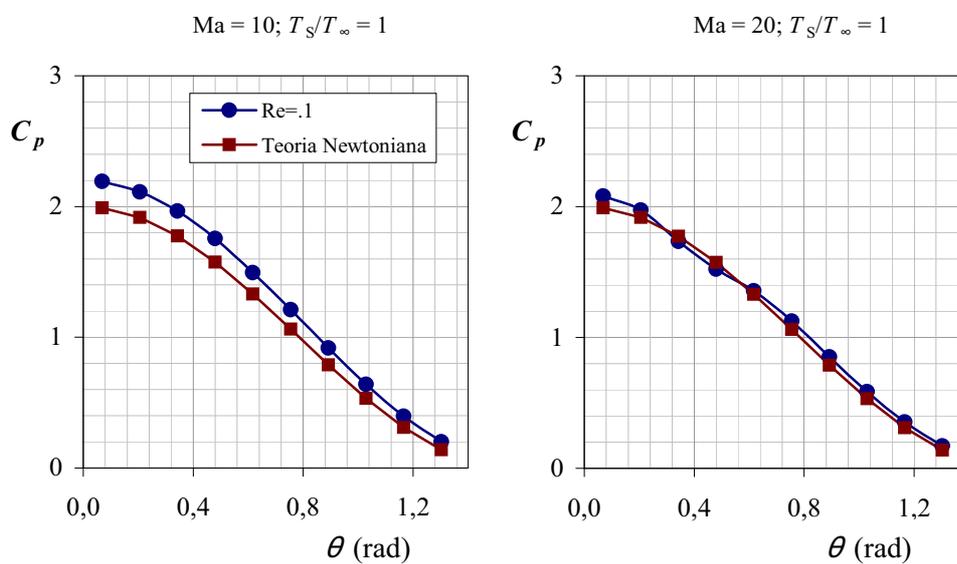


Figura 60: Comparação entre C_p calculado pela técnica DSMC e o previsto pela teoria Newtoniana.

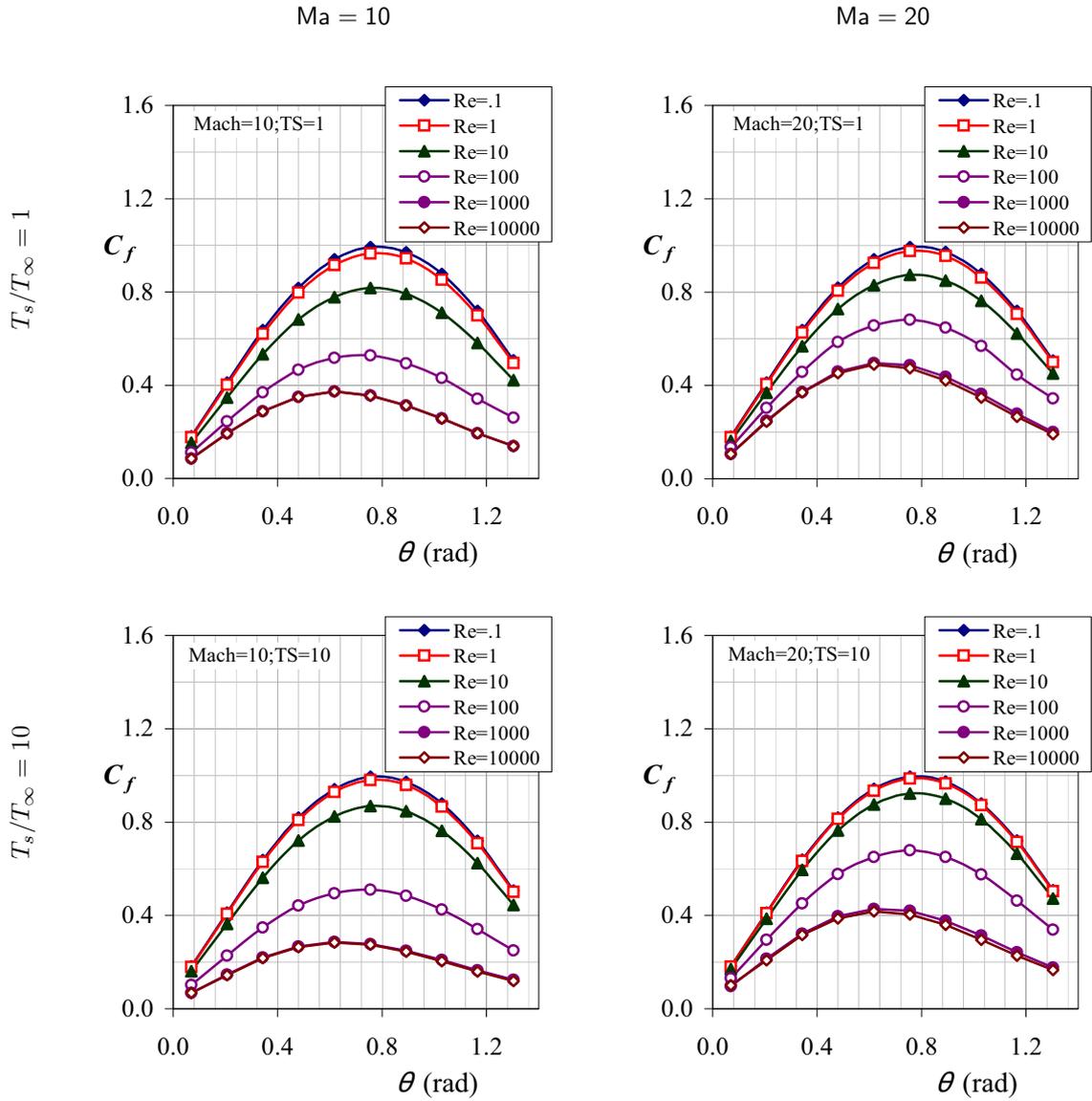


Figura 61: Coeficiente de atrito na ponta da ogiva do satélite.

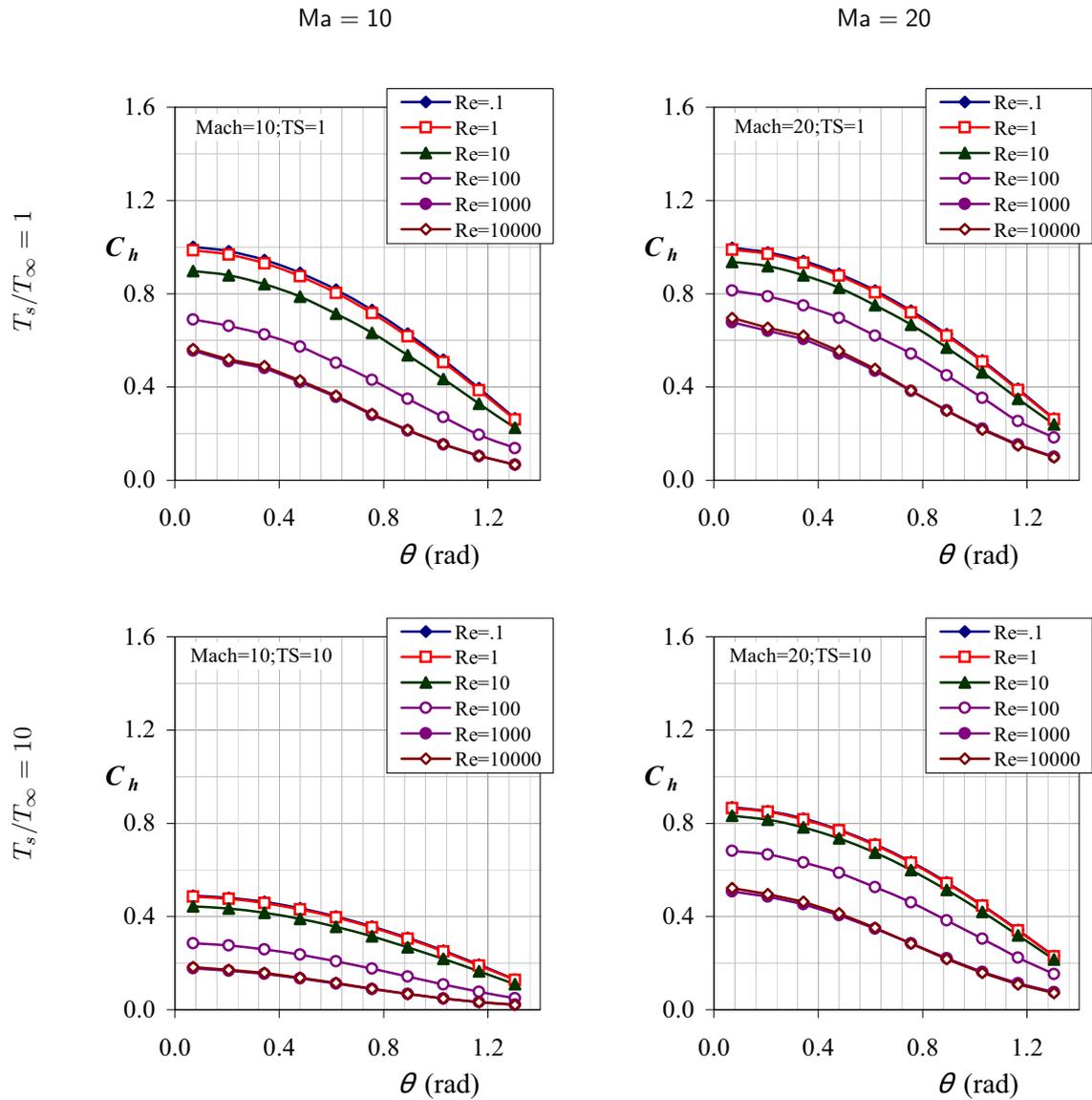


Figura 62: Coeficiente de transferência de energia na ponta da ogiva do satélite.

4.3.6 Linhas de Corrente

As linhas de corrente do escoamento no espaço ao redor do satélite são apresentadas nas Figuras 63 e 64 para $Ma = 10$ e 20 , respectivamente. No *Apêndice F – Escoamento ao Redor do Satélite* (págs. 200 e 204), alguns conjuntos de linhas de corrente são mostradas com mais detalhes. Para ambos números de Mach o comportamento qualitativo das linhas de corrente é semelhante: desvios suaves para regime de moléculas livres, e desvios mais acentuados à medida que se aproxima do regime hidrodinâmico. Para $Re = 10000$ (regime hidrodinâmico) o desvio abrupto das linhas de corrente próximas ao satélite caracteriza o surgimento de uma onda de choque. Neste mesmo regime os efeitos viscosos ficam evidentes com o aparecimento de vorticidade na base do satélite.

4.3.7 Distribuição de Densidade

Nas Figuras 65 e 66 são apresentadas as distribuições de densidade, ρ/ρ_∞ , no espaço ao redor do satélite para $Ma = 10$ e 20 , respectivamente. No *Apêndice F – Escoamento ao Redor do Satélite* (págs. 201 e 205), algumas distribuições de densidade são mostradas com mais detalhes. Fica evidente nestas figuras, para ambos os números de Mach, a mudança qualitativa do escoamento à medida que o número de Reynolds aumenta, o que significa a diminuição da rarefação e aumento da interação entre as partículas do escoamento. No regime de moléculas livres, as partículas se chocam com a superfície e são refletidas em determinada direção, sem alterar mais sua trajetória (não há choques), e uma “sombra” (vácuo) com contorno nítido e paralelo ao escoamento não perturbado se forma atrás do satélite, onde praticamente não existem partículas advindas do escoamento à jusante. Caminhando-se na direção do regime hidrodinâmico, os choques entre partículas começam a ocorrer com frequência cada vez mais alta, e as partículas refletidas pela superfície passam então a interagir de forma mais forte com as partículas incidentes do escoamento não perturbado. Com isso, uma onda de choque cada vez mais intensa se forma à frente do satélite, e a maior interação entre partículas também torna a delimitação da “sombra” atrás do satélite menos definida. Para o caso do satélite “aquecido”, como as partículas são refletidas com mais energia, a onda de choque formada a partir da região de transição tende a se distanciar mais da superfície do que para o satélite “frio”, conforme mostra essa figura.

4.3.8 Distribuição de Temperatura

Nas Figuras 67 e 68 são apresentadas as distribuições de temperatura, T/T_∞ , no espaço ao redor do satélite para $Ma = 10$ e 20 , respectivamente. No *Apêndice F - Escoamento ao Redor do Satélite* (págs.202 e 206), algumas distribuições de temperatura são mostradas com mais detalhes. Mais claramente do que nas figuras para a distribuição de densidade, nesta figuras fica explícito a diferença qualitativa do escoamento nos três regimes de escoamento. No regime hidrodinâmico ($Re = 10000$) está bem caracterizada a onda de choque destacada que se forma à frente do satélite; à medida que a rarefação aumenta ($Re = 100$ e 10), a onda de choque se afasta e se torna menos nítida (menos intensa), até desaparecer no regime de moléculas livres ($Re = 0.1$). O padrão do escoamento é semelhante para ambos o valores de Ma mas, quantitativamente falando, a variação de temperatura dentro do campo de escoamento é tanto maior quanto maior o valor de Ma . Para $Ma = 10$ a temperatura na frente do satélite é da ordem de 20 vezes maior que a temperatura do gás não perturbado, enquanto que para $Ma = 20$ o aumento da temperatura é da ordem de 60 vezes maior.

4.3.9 Distribuição do Número de Mach Local

Nas Figuras 69 e 70 são apresentadas as distribuições do número de Mach local, Ma_L , no espaço ao redor do satélite para $Ma = 10$ e 20 , respectivamente. No *Apêndice F - Escoamento ao Redor do Satélite* (págs.203 e 207), algumas distribuições de número de Mach local são mostradas com mais detalhes. No regime hidrodinâmico ($Re = 10000$) é possível observar uma forte queda do número de Mach dentro da onda de choque e a ocorrência de vorticidade na base do satélite devido aos efeitos viscosos existentes nesse regime. No regime de transição, onde efeitos viscosos diminuem, a vorticidade desaparece e a variação do número de Mach local ocorre ao longo de uma distância maior. No regime de moléculas livres, a distribuição do número de Mach local é completamente diversa daquela que ocorre no regime hidrodinâmico, mostrando a diferença qualitativa do escoamento em relação ao regime hidrodinâmico.

Regime de moléculas livres

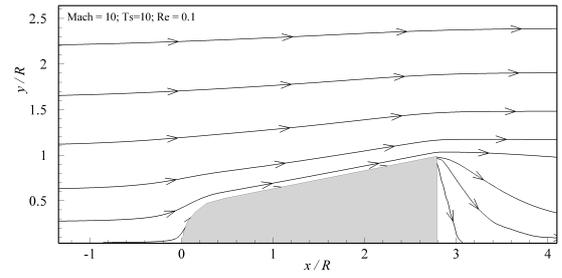
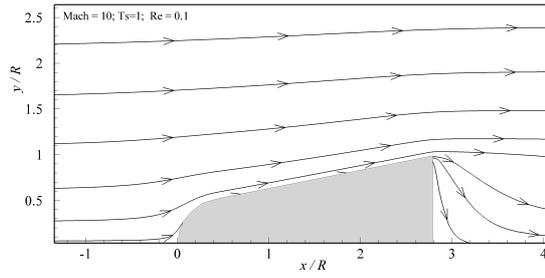


Re

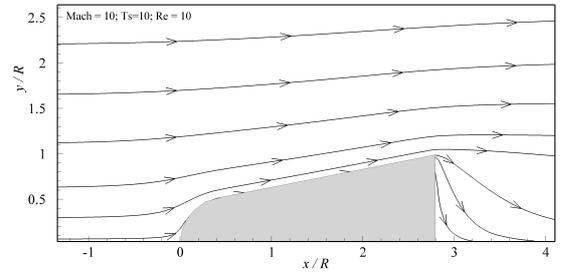
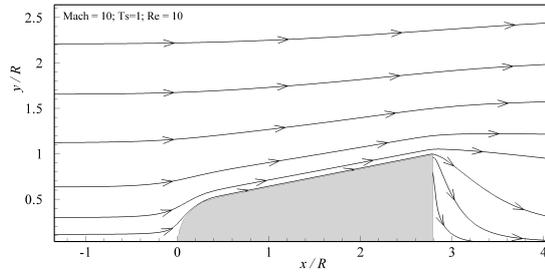
$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$

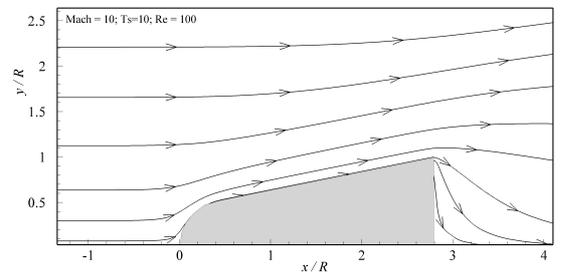
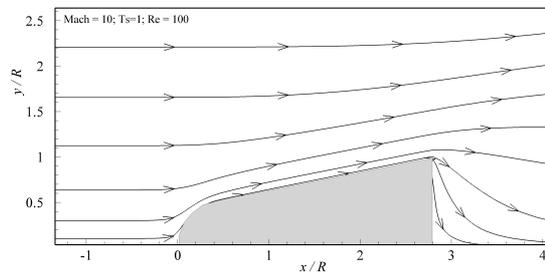
0.1



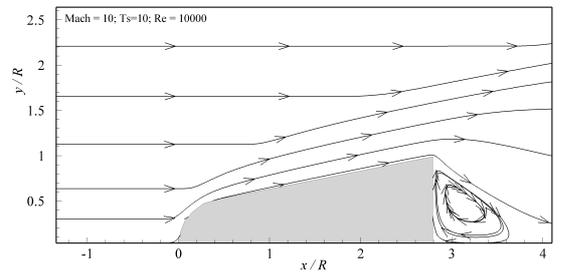
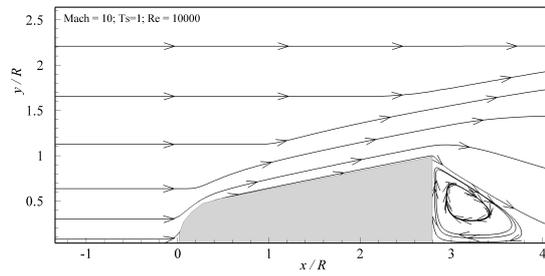
10



100



10000



Regime hidrodinâmico

Figura 63: Linhas de corrente para $Ma = 10$.

Regime de moléculas livres

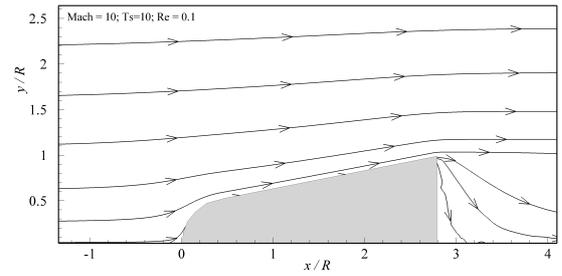
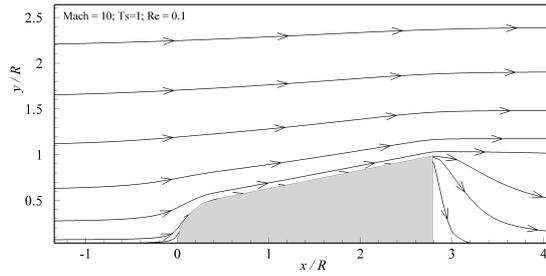


Re

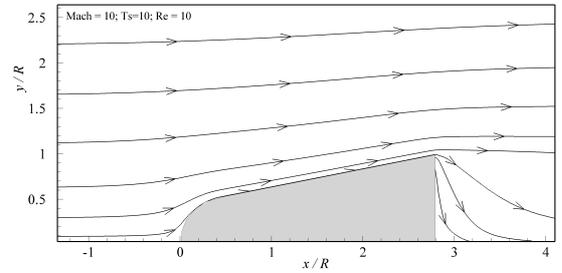
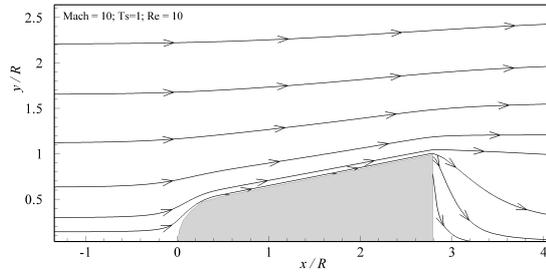
$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$

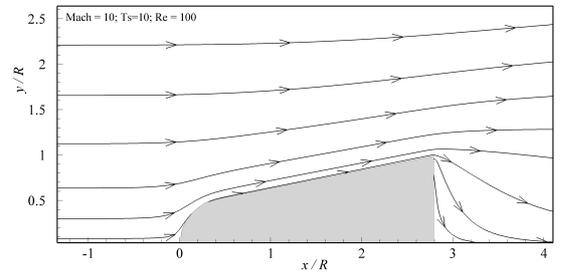
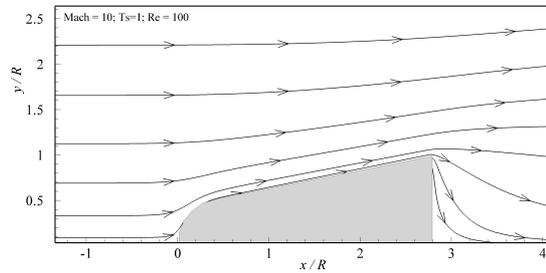
0.1



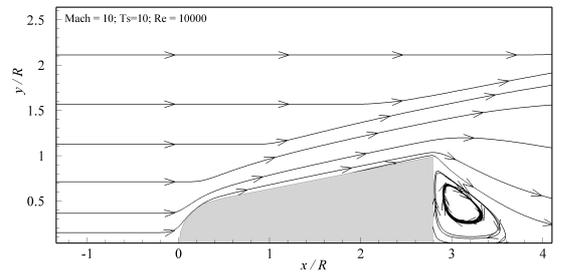
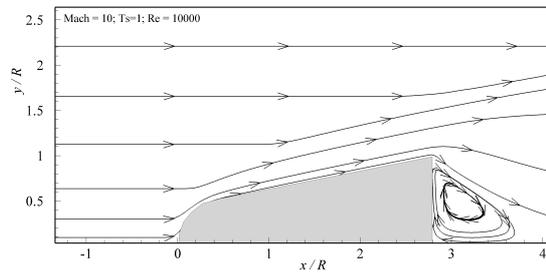
10



100



10000



Regime hidrodinâmico

Figura 64: Linhas de corrente para $Ma = 20$.

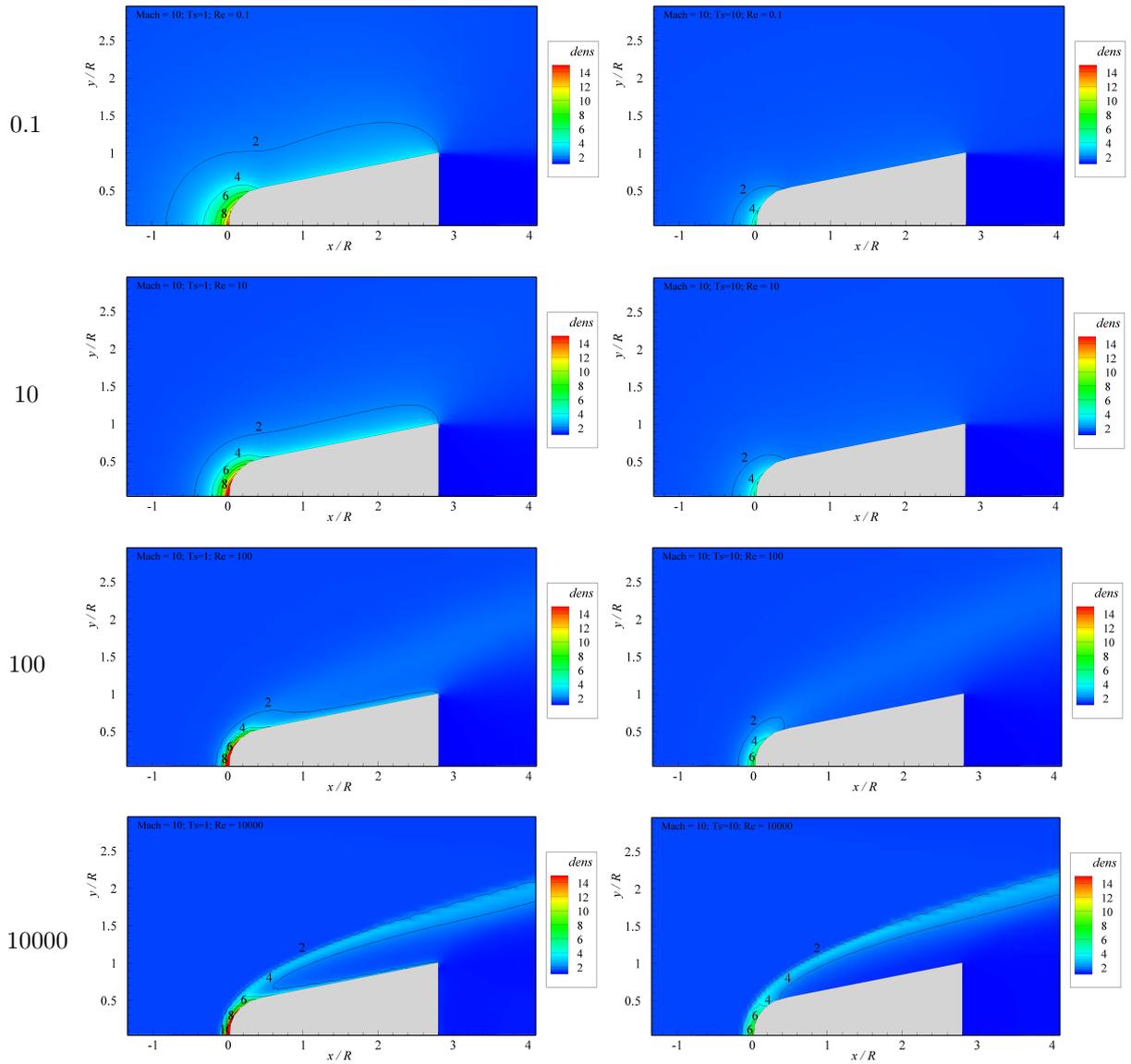
Regime de moléculas livres



Re

$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$



Regime hidrodinâmico

Figura 65: Campo de densidade (ρ/ρ_∞) para $Ma = 10$.

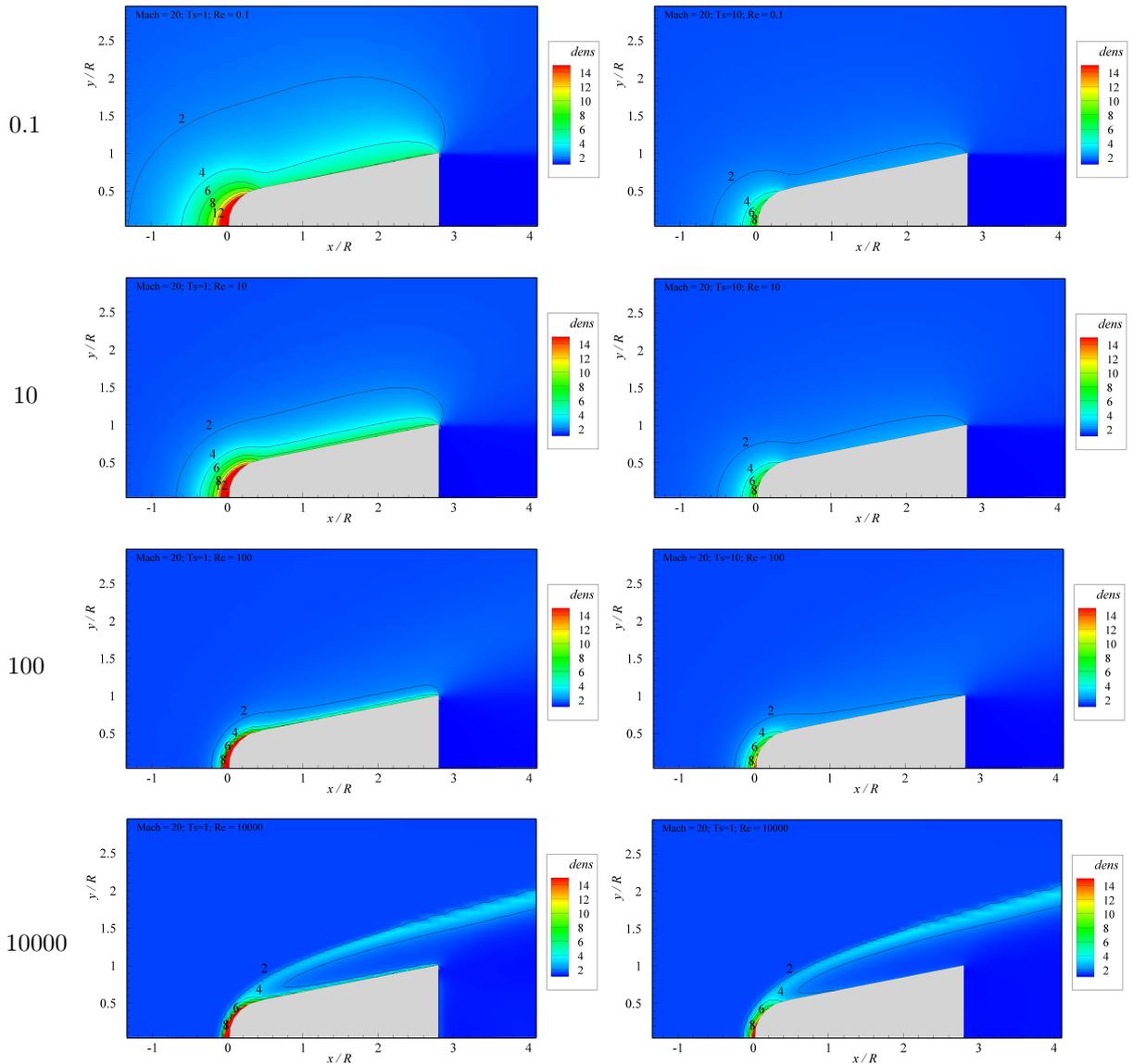
Regime de moléculas livres



Re

$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$



Regime hidrodinâmico

Figura 66: Campo de densidade (ρ/ρ_∞) para $Ma = 20$.

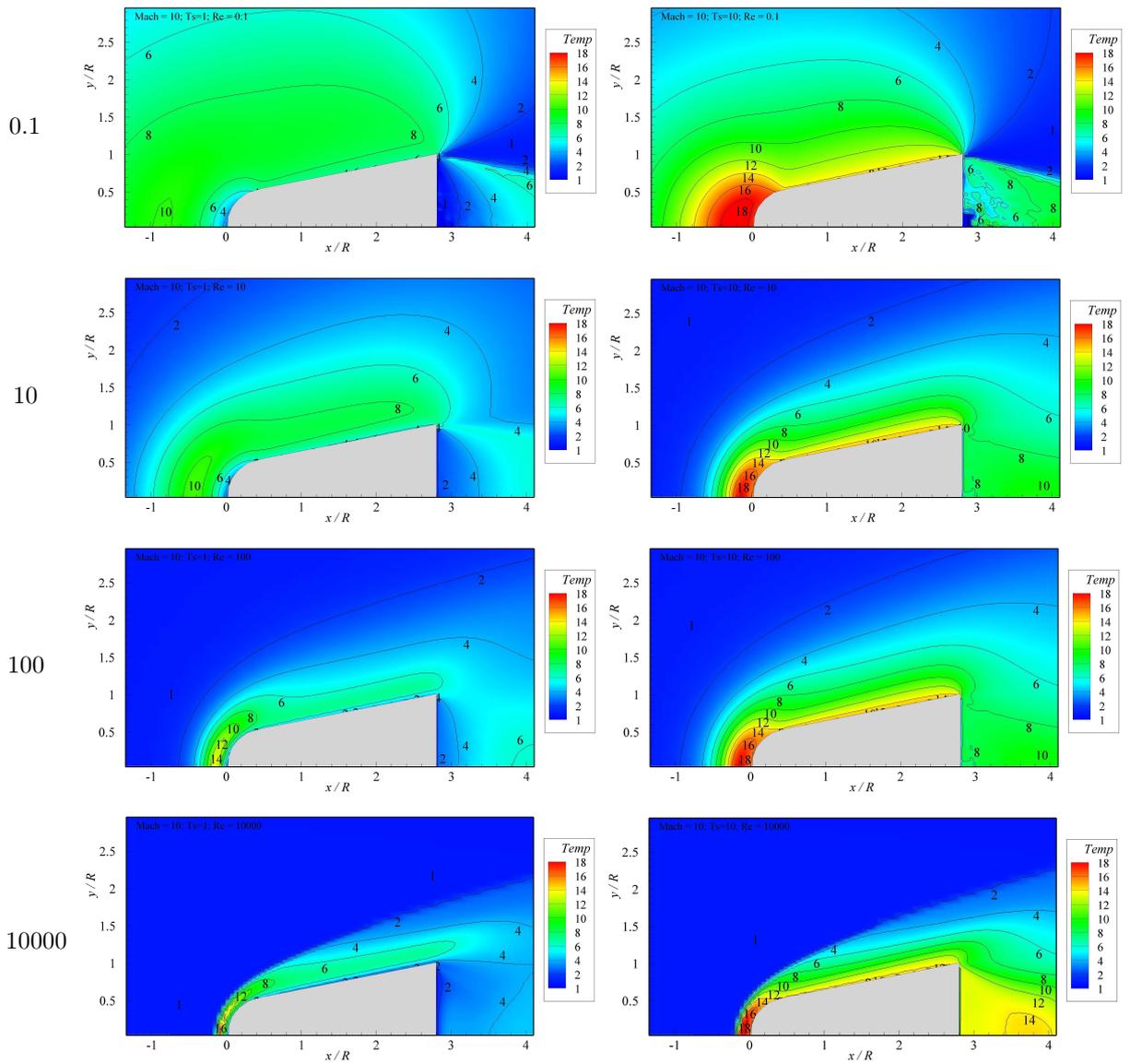
Regime de moléculas livres



Re

$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$



Regime hidrodinâmico

Figura 67: Campo de temperatura (T/T_∞) para $Ma = 10$.

Regime de moléculas livres

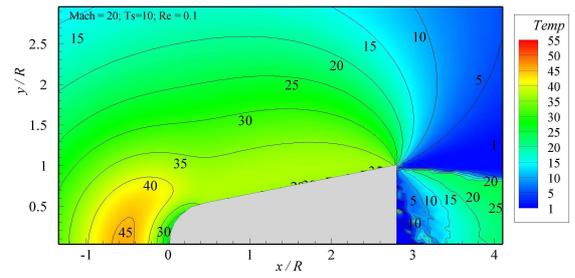
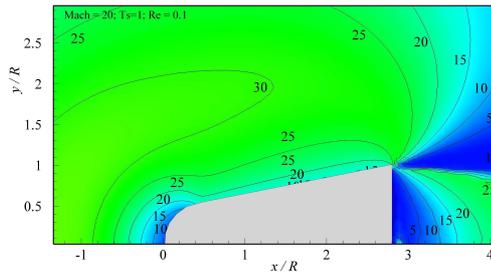


Re

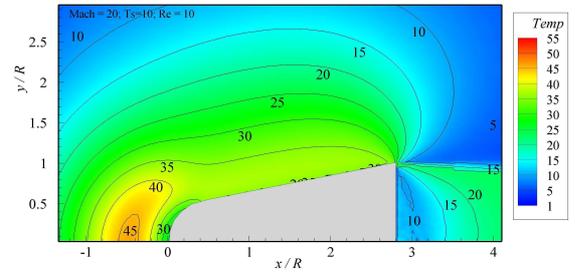
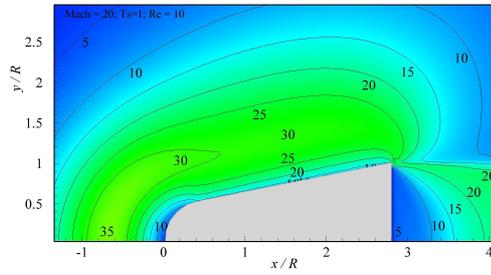
$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$

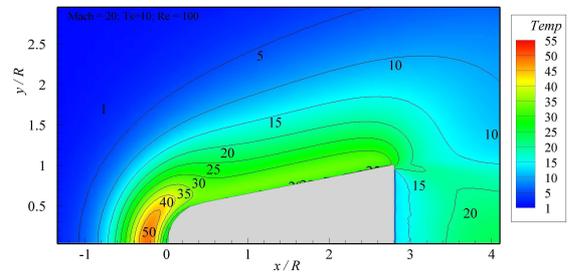
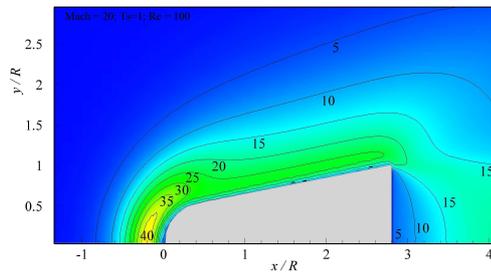
0.1



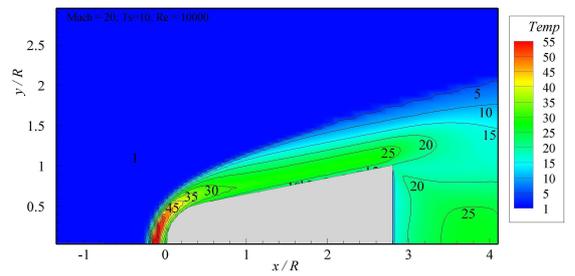
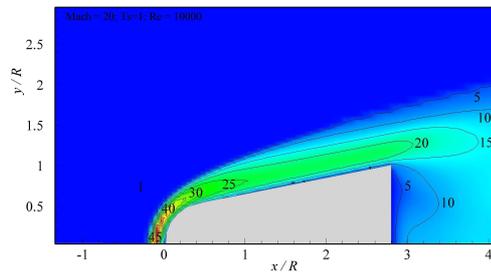
10



100



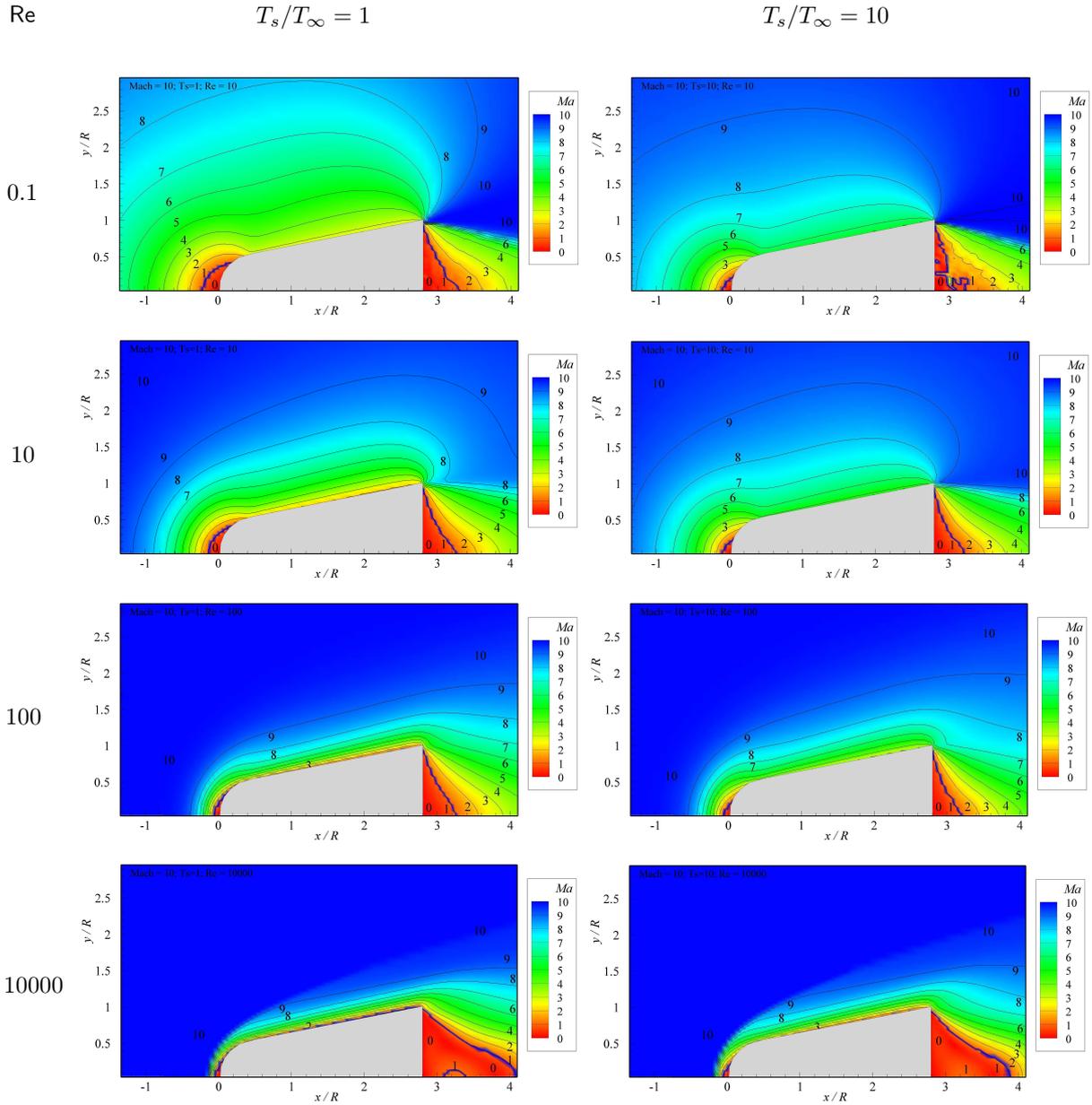
10000



Regime hidrodinâmico

Figura 68: Campo de temperatura (T/T_∞) para $Ma = 20$.

Regime de moléculas livres



Regime hidrodinâmico

Figura 69: Número de Mach local para $Ma = 10$.

Regime de moléculas livres

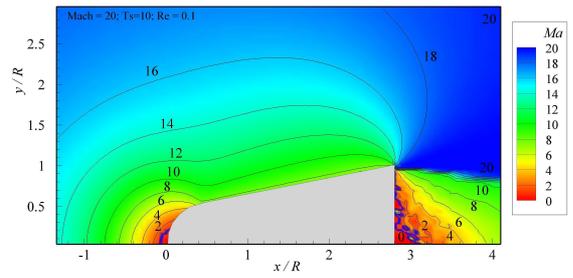
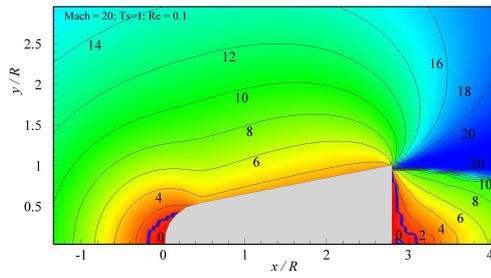


Re

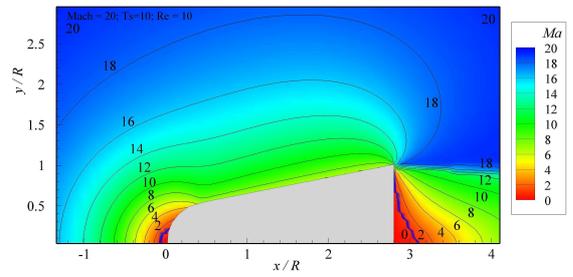
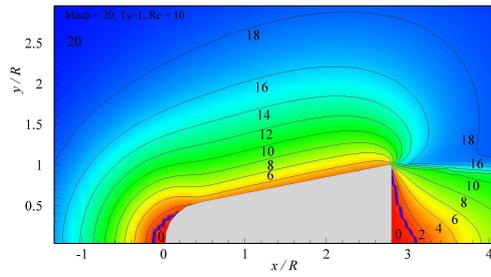
$T_s/T_\infty = 1$

$T_s/T_\infty = 10$

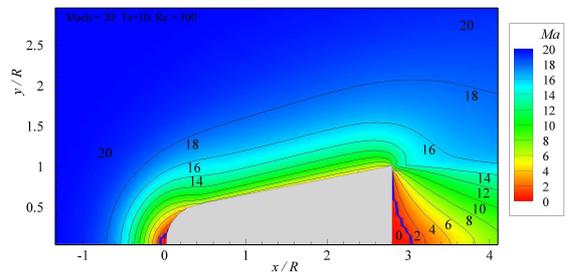
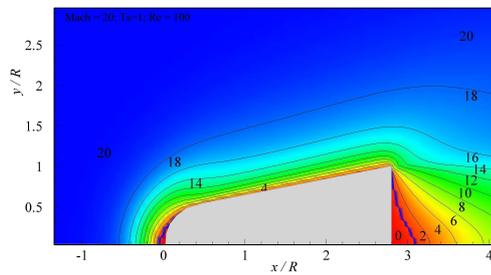
0.1



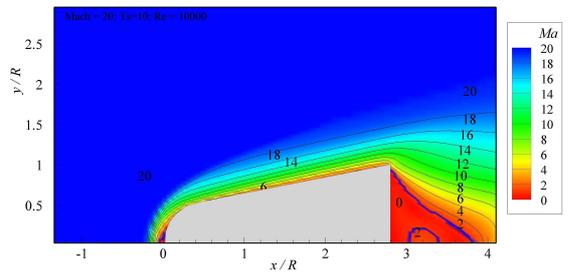
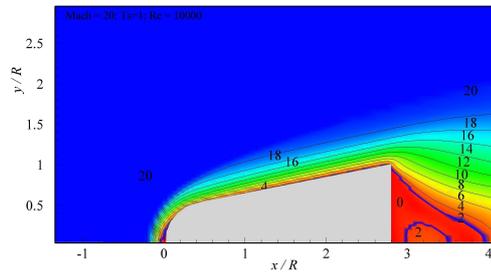
10



100



10000



Regime hidrodinâmico

Figura 70: Número de Mach local para $Ma = 20$.

4.3.10 Resultados Numéricos

4.3.10.1 Coeficientes Adimensionais

Nas Tabelas 9, 10, 11 e 12 são apresentados os resultados de cálculo, respectivamente, para os coeficientes de arrasto, C_D , pressão, C_p , atrito, C_f e energia, C_h , considerando escoamento de gás monoatômico e diatômico em torno do satélite SARA.

4.3.10.2 Comparação dos Resultados

Os resultados de cálculo obtidos considerando tanto gás monoatômico como diatômico são qualitativamente muito semelhantes entre si. Quantitativamente falando, para a maior parte dos parâmetros calculados a diferença é inexistente para o regime de moléculas livres considerando os dois modelos (gás monoatômico e gás diatômico, N_2), muito pequena na região de transição, e pouco maior no regime hidrodinâmico, conforme mostra a Tabela 13. Na mesma tabela, considerando apenas o regime hidrodinâmico, observa-se que os coeficientes de arrasto e de pressão, C_D e C_p , são os menos sensíveis ao tipo de modelo utilizado, ao passo que os coeficientes de atrito e de transferência de energia, C_f (para $\theta \approx \pi/4$) e C_h (para $\theta \approx 0$), sofrem uma influência maior, mas cujas diferenças não ultrapassam a faixa de 10%. Ainda no regime hidrodinâmico, a temperatura do satélite tem uma influência maior apenas nos valores dos coeficientes de atrito e de transferência de energia.

Uma observação a se fazer é que houve uma diminuição no valor do coeficiente de arrasto, C_D , no regime hidrodinâmico para o gás diatômico em relação ao monoatômico, embora ΔC_p ($\theta \approx 0$) e ΔC_f ($\theta \approx \pi/4$) sejam maiores, o que poderia indicar um contradição. Entretanto, conforme mostra a Figura 71, os coeficientes de pressão e atrito são maiores perto da ponta da ogiva para o gás diatômico, mas à medida que se caminha em direção à base do satélite, este comportamento se inverte, de tal forma que as integrais ao longo da coordenada x para as componentes horizontais de cada um destes coeficientes, que são as que contribuem para o arrasto, acabam sendo menores para o gás diatômico (da ordem de 1 a 2% menores neste caso em particular), explicando a diminuição do coeficiente de arrasto observada.

Tabela 9: Valores numéricos do coeficiente de arrasto, C_D , para gás monoatômico e diatômico.

Ma	Re	Monoatômico		Diatômico		Diatômico-Monoatômico	
		$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\Delta C_D(\frac{T_s}{T_\infty} = 1)$	$\Delta C_D(\frac{T_s}{T_\infty} = 10)$
10	0.1	2.081	2.235	2.081	2.235	0.0%	0.0%
	1	2.036	2.207	2.036	2.207	0.0%	0.0%
	10	1.718	1.962	1.711	1.958	-0.4%	-0.2%
	100	1.045	1.129	1.031	1.116	-1.3%	-1.2%
	1000	0.601	0.622	0.596	0.617	-0.8%	-0.7%
	10000	0.557	0.535	0.561	0.537	0.7%	0.2%
20	0.1	2.036	2.113	2.036	2.113	0.0%	0.0%
	1	2.007	2.099	2.007	2.099	0.0%	0.0%
	10	1.780	1.966	1.779	1.963	-0.1%	-0.2%
	100	1.276	1.373	1.262	1.358	-1.1%	-1.1%
	1000	0.728	0.731	0.705	0.705	-3.1%	-3.5%
	10000	0.636	0.615	0.627	0.600	-1.5%	-2.4%

Tabela 10: Valores numéricos do coeficiente de pressão, C_p , nas proximidades do ápice da ponta da ogiva ($\theta \approx 0$) - gás monoatômico e diatômico.

Ma	Re	Monoatômico		Diatômico		Diatômico-Monoatômico	
		$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\Delta C_p(\frac{T_s}{T_\infty} = 1)$	$\Delta C_p(\frac{T_s}{T_\infty} = 10)$
10	0.1	2.189	2.645	2.190	2.646	0.0%	0.0%
	1	2.162	2.625	2.164	2.624	0.1%	0.0%
	10	2.031	2.454	2.035	2.456	0.2%	0.1%
	100	1.926	1.989	1.929	1.994	0.2%	0.2%
	1000	1.776	1.764	1.823	1.796	2.6%	1.8%
	10000	1.766	1.756	1.822	1.794	3.2%	2.2%
20	0.1	2.086	2.314	2.085	2.314	0.0%	0.0%
	1	2.071	2.306	2.071	2.305	0.0%	0.0%
	10	1.992	2.232	1.996	2.234	0.2%	0.1%
	100	1.965	2.008	1.964	2.011	-0.1%	0.1%
	1000	1.821	1.822	1.855	1.847	1.8%	1.4%
	10000	1.803	1.797	1.851	1.835	2.6%	2.1%

Tabela 11: Valores numéricos do coeficiente de atrito, C_f , para $\theta = \pi/4$ - gás monoatômico e diatômico.

Ma	Re	Monoatômico		Diatômico		Diatômico-Monoatômico	
		$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\Delta C_f(\frac{T_s}{T_\infty} = 1)$	$\Delta C_f(\frac{T_s}{T_\infty} = 10)$
10	0.1	0.992	0.994	0.992	0.994	0.0%	0.0%
	1	0.964	0.980	0.965	0.980	0.1%	0.0%
	10	0.811	0.867	0.817	0.868	0.7%	0.1%
	100	0.518	0.507	0.527	0.510	1.7%	0.6%
	1000	0.333	0.273	0.356	0.278	7.0%	1.6%
	10000	0.329	0.270	0.355	0.275	7.9%	1.9%
20	0.1	0.993	0.994	0.993	0.994	0.0%	0.0%
	1	0.975	0.987	0.976	0.987	0.1%	0.0%
	10	0.867	0.921	0.874	0.923	0.7%	0.2%
	100	0.673	0.674	0.681	0.679	1.3%	0.8%
	1000	0.455	0.407	0.486	0.420	6.8%	3.3%
	10000	0.432	0.383	0.473	0.404	9.6%	5.3%

Tabela 12: Valores numéricos do coeficiente de transferência de energia, C_h , para $\theta \approx 0$ - gás monoatômico e diatômico.

Ma	Re	Monoatômico		Diatômico		Diatômico-Monoatômico	
		$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 1$	$\frac{T_s}{T_\infty} = 10$	$\Delta C_h(\frac{T_s}{T_\infty} = 1)$	$\Delta C_h(\frac{T_s}{T_\infty} = 10)$
10	0.1	1.001	0.490	1.001	0.490	0.0%	0.0%
	1	0.986	0.485	0.987	0.485	0.1%	0.0%
	10	0.895	0.444	0.898	0.443	0.3%	-0.1%
	100	0.676	0.286	0.690	0.285	2.1%	-0.4%
	1000	0.489	0.173	0.556	0.179	13.7%	3.3%
	10000	0.492	0.179	0.563	0.183	14.4%	2.2%
20	0.1	0.996	0.869	0.996	0.869	0.0%	0.0%
	1	0.989	0.865	0.989	0.865	0.0%	0.0%
	10	0.934	0.831	0.937	0.831	0.3%	0.1%
	100	0.803	0.679	0.813	0.682	1.3%	0.4%
	1000	0.617	0.477	0.678	0.507	9.8%	6.3%
	10000	0.634	0.492	0.696	0.522	9.7%	6.2%

Tabela 13: Resumo das diferenças relativas dos diversos parâmetros calculados para gás diatômico e monoatômico.

$\Delta\text{Par.}$ ↓	$\Delta\text{Par.} = (\text{Par.})_{\text{Diat.}} - (\text{Par.})_{\text{Monoat.}}$						
	Ma	10			20		
	Regime	Mol.Liv.	Trans.	Hidrod.	Mol.Liv.	Trans.	Hidrod.
ΔC_D	$T_s/T_\infty = 1$	0%	-1%	0%	0%	-1%	-2%
	$T_s/T_\infty = 10$	0%	-1%	0%	0%	-1%	-3%
$\Delta C_p (\theta \approx 0)$	$T_s/T_\infty = 1$	0%	0%	3%	0%	0%	2%
	$T_s/T_\infty = 10$	0%	0%	2%	0%	0%	2%
$\Delta C_f (\theta \approx \pi/4)$	$T_s/T_\infty = 1$	0%	1%	7%	0%	1%	8%
	$T_s/T_\infty = 10$	0%	0%	2%	0%	1%	4%
$\Delta C_h (\theta \approx 0)$	$T_s/T_\infty = 1$	0%	1%	14%	0%	1%	10%
	$T_s/T_\infty = 10$	0%	0%	3%	0%	0%	6%

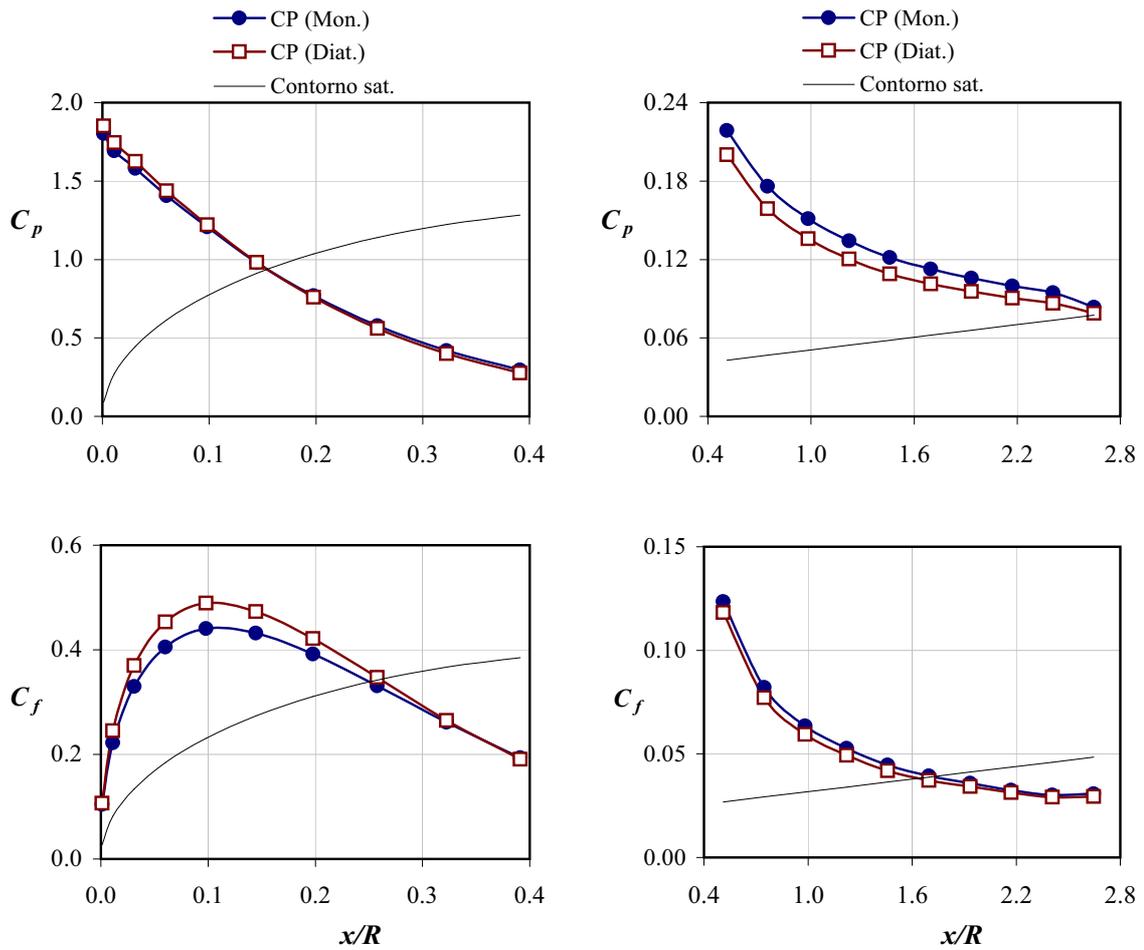


Figura 71: Distribuição dos coeficientes de pressão, C_p , e atrito, C_f , ao longo da superfície do satélite para $\text{Ma} = 20$, $T_s/T_\infty = 1$ e $\text{Re} = 10000$ (gás monoatômico e diatômico - regime hidrodinâmico).

4.4 Comentários e Discussão

Neste capítulo utilizou-se o método DSMC para calcular os coeficientes de arrasto, de pressão, de atrito e de transferência de energia, bem como o campo de escoamento ao redor do satélite durante o vôo orbital e a reentrada na atmosfera considerando o gás como diatômico. O gás considerado foi o nitrogênio, N_2 , principal constituinte da atmosfera. Para tal, as interações entre as partículas do escoamento, e entre as partículas e a superfície do satélite, foram tratadas de forma diferente do caso do gás monoatômico, onde o modelo de choque elástico é considerado e apenas intercâmbio de energia translacional ocorre. Para gases poliatômicos, outros modos de energia, como o rotacional e o vibracional, são intercambiados durante as interações, e o choque entre partículas, e entre partículas e superfície, deixa de ser elástico. Para considerar este tipo de interação o modelo de Larsen-Borgnakke foi utilizado e aplicado para o caso diatômico, e a forma de interação partícula-partícula utilizada foi o modelo VHS (Variable Hard Sphere).

Os resultados obtidos são qualitativamente muito semelhantes considerando tanto gás monoatômico como diatômico, dos quais se pode concluir, do ponto de vista quantitativo, que a hipótese de gás monoatômico é aplicável no estudo dessa classe de escoamento nos regimes de moléculas livres e de transição sem maiores implicações. Para o regime hidrodinâmico as diferenças parecem não ser muito significativas, apenas os coeficientes de atrito e de transferência de energia se mostram pouco maiores considerando gás diatômico ao invés de gás monoatômico. Entretanto, conforme discutido no *Apêndice E – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento ao redor do Satélite*, uma análise um pouco mais detalhada do regime hidrodinâmico ainda se faz necessária, uma vez que há indicação de que o nível de discretização da grade de células necessita ser maior nesse regime do que o utilizado no presente trabalho.

5 *Conclusão*

Neste último capítulo um resumo geral sobre o que foi realizado nesta tese é apresentado, com comentários sobre a motivação do trabalho, sobre os resultados obtidos, as dificuldades encontradas e os próximos passos possíveis na pesquisa e desenvolvimento dos métodos da DGR e suas aplicações na engenharia aeroespacial, particularmente usando a técnica DSMC.

5.1 Considerações Gerais

O intuito inicial deste trabalho era o emprego de um método numérico da dinâmica dos gases rarefeitos, o método DSMC, na solução de um problema relacionado com escoamentos em MEMS e NEMS, que é o escoamento através de uma fenda estreita, e sua consequente extensão para estudo do escoamento em canais. Entretanto, no decorrer desse trabalho surgiu a oportunidade de desenvolver um estudo junto ao Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE) relacionado com a aerodinâmica de satélites. Sendo os problemas da engenharia aeroespacial um assunto de grande interesse do autor, que já desenvolveu trabalhos nessa área [144, 145], manteve-se a análise do escoamento através de uma fenda, que também tem aplicação em escoamentos através de bocais de micro e nano sistemas propulsivos, e incluiu-se o estudo da aerodinâmica do satélite SARA, problema de engenharia em pauta no IAE, resultando assim o conteúdo desta tese.

5.2 Sobre os Resultados

Nesta tese foram analisados escoamentos interno e externo de gases relacionados com problemas da engenharia aeroespacial. Uma ampla faixa de rarefação foi considerada, compreendendo desde o regime de moléculas livres, onde inexiste a colisão entre as moléculas, até o regime hidrodinâmico, onde a hipótese de meio contínuo é válida, passando por um regime intermediário, de transição, entre os dois primeiros. Os métodos disponíveis para análise de escoamentos onde existe rarefação do gás foram discutidos, sendo a Simulação Direta de Monte Carlo (DSMC) apontada como a técnica adequada para estudo de escoamentos como os abordados neste trabalho, razão pela qual foi utilizada.

5.2.1 Escoamento através de Fenda

O primeiro escoamento analisado, interno, foi o escoamento através de uma fenda estreita com simetria plana que separa dois reservatórios com pressões distintas. Trata-se de um problema pouco explorado na literatura, com poucos resultados disponíveis, mas que possui utilização em várias aplicações, como no estudo de jatos e micro-propulsores. Foram obtidos:

- O fluxo de massa através da fenda.
- Parâmetros do campo de escoamento, como densidade e temperatura, considerando

o gás como monoatômico.

- Uma fórmula interpolante para o fluxo de massa através da fenda em função da razão de pressão entre os reservatórios, p_1/p_0 , e do parâmetro que de rarefação, δ (vide expressão (3.14), pág. 110).

O fluxo de massa calculado pode ser útil em problemas que apresentem semelhança ao escoamento através de uma fenda, como é o caso específico, já citado, da calibração de bancos de teste de micro e nano-propulsores. Os resultados do fluxo de massa foram comparados com os do escoamento através de orifícios, sendo a diferença pequena no regime hidrodinâmico, sugerindo uma certa independência do fluxo de massa em relação ao formato da área de passagem neste regime e generalizando sua utilização para várias outras geometrias.

As dificuldades encontradas estão relacionadas, na sua grande maioria, ao esforço computacional necessário para calcular o escoamento, uma vez que uma área relativamente grande à jusante da fenda é necessária, visto que a condição de contorno de escoamento não perturbado só pode ser considerado a uma distância significativa da fenda, o que aumenta significativamente o número de células inclusas no cálculo. Para obter apenas um ponto da curva de fluxo de massa adimensional através da fenda no regime hidrodinâmico e uma razão de pressão elevada (0.7), cerca de dois a três meses de computação são necessários para obter resultados com flutuação estatística satisfatória. Para regime de moléculas livres e razões de pressão mais baixas o esforço é menor, mas não desprezível, sendo da ordem de semanas. O que ocorre é que nem sempre os servidores conseguem ficar tanto tempo funcionando sem enfrentar algum tipo de problema, como queda de energia ou algum travamento do sistema operacional. Muitos “jobs” tiveram que ser relançados até se obter o ponto desejado, sem contar o fato de vários resultados terem sido descartados após a detecção de algum erro no código DSMC, visto que este também foi desenvolvido e adaptado a partir de códigos pré-existentes ao longo do processo. Não se estará errando em dizer que praticamente dois anos foram necessários para se obter os resultados computacionais relativos apenas a este escoamento.

5.2.2 Aerotermodinâmica do veículo SARA

O segundo escoamento analisado, externo, foi o escoamento em torno de um satélite durante a reentrada atmosférica (satélite SARA do Instituto de Aeronáutica e Espaço, em São José dos Campos, SP). Tal análise foi uma demanda desse instituto, visto que

se desejava avaliar a influência nos diversos parâmetros do escoamento em passando da consideração de gás monoatômico para a de gás diatômico. A análise foi feita para vôo hipersônico, gás não reativo e ampla variação do nível de rarefação, sendo obtidos:

- coeficiente de arrasto;
- coeficiente de pressão;
- coeficiente de atrito;
- coeficiente de transferência de energia;
- distribuições de densidade, temperatura e número de Mach local.

Para o coeficiente de arrasto uma fórmula interpolante foi proposta em função do parâmetro de rarefação (vide expressão (4.29), pág. 139). Conforme já mencionado, estes resultados são úteis para definição de proteção térmica, análise de esforços e cálculos de trajetografia. O campo de escoamento foi analisado através das distribuições de densidade, temperatura e número de Mach local.

Os valores obtidos para os coeficientes podem ser considerados razoavelmente confiáveis para os regimes de moléculas livres e de transição, mas conforme comentado no *Apêndice E – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento ao redor do Satélite*, a análise do escoamento no regime hidrodinâmico merece um pouco mais de esforço e atenção, visto que a discretização necessária para a grade de células é maior. Pode-se dizer que neste regime o valor do coeficiente de arrasto está sobrestimado, e dos outros coeficiente subestimados.

Cabem aqui comentários semelhantes aos dos escoamentos através de fenda no que tange às dificuldades computacionais encontradas. Conforme o regime hidrodinâmico se aproxima, a necessidade de uma discretização maior da grade de células, e um eventual aumento do número de partículas modelo, torna cada simulação mais e mais custosa em termos computacionais.

5.3 Evolução Futura

Sempre é possível, a partir da consecução de um estudo como este, perceber pontos que poderiam ser melhor trabalhados e com potencial de evolução.

O primeiro ponto merecedor de atenção é a implementação do próprio método DSMC. Esquemas de otimização, de discretização e de aceleração do algoritmo devem ser avaliados visando a melhoria da eficiência do código computacional.

Quanto ao escoamento através de fendas, provavelmente a avaliação da influência dos diversos modelos de interação partícula-partícula e partícula-superfície, bem como a análise do escoamento de gases poliatômicos, ou de misturas, reativos ou não, estacionários ou não, sejam próximos passos a serem dados, porém anteriores à realização de cálculos de escoamentos em geometrias mais complexas.

No caso da aerodinâmica de satélites, existe o desafio computacional da obtenção de resultados no regime hidrodinâmico com discretização maior da grade de células. Entretanto, em se tratando de escoamento supersônico, a possibilidade de escoamento de gases reativos (dissociação e ionização; misturas) se faz muito presente e deve ser, na medida do possível, considerada, o que implica na avaliação de outros modelos de interação partícula-partícula e partícula superfície. Escoamentos não-estacionários também podem ser alvo de investigação.

Referências

- [1] STANZIONE, K. A. *Engineering*. [S.l.]: Encyclopædia Britannica, 1989. 563-563 p.
- [2] RAYMER, P. R. *Aircraft Design: A Conceptual Approach*. 4. ed. Blacksburg, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 2006.
- [3] WYKEHAM, P. *Santos Dumont - Retrato de uma obsessão*. [S.l.]: Civilização Brasileira, 1966.
- [4] BENEDETTI, F. *100 Years Ago, the Dream of Icarus Became Reality*. [S.l.]: Fédération Aéronautique Internationale, 2003. [Http://www.fai.org/news_archives/fai/000295.asp](http://www.fai.org/news_archives/fai/000295.asp). [acesso: 28-Out-2010].
- [5] SCHLINGLOFF, H. *Astronautical Engineering*. Bad Abbach, Germany: Ingenieurbüro Dr. Schlingloff Publications, 2005.
- [6] ANDERSON, J. D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. New York: McGraw-Hill, Inc., 1989.
- [7] WINTER, O. C.; PRADO, A. F. B. A. *A Conquista do Espaço - do Sputnik à Missão Centenário*. [S.l.]: Agência Espacial Brasileira, 2007.
- [8] NIELSEN, J. N. *Missile aerodynamics*. Mountain View, California: Nielsen Engineering & Research, 1988.
- [9] SHAPIRO, A. H. *The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1953.
- [10] DAVIES, M. *Standard Handbook for Aeronautical and Astronautical Engineers*. [S.l.]: McGraw-Hill Professional, 2003.
- [11] SCHAAF, S. A.; CHAMBRÉ, P. L. *Flow of Rarefied Gases*. Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1961. Princeton Aeronautical Paperbacks.
- [12] KOGAN, M. N. *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Plenum, 1969.
- [13] CERCIGNANI, C. *Rarefied Gas Dynamics. From Basic Concepts to Actual Calculations*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [14] SHEN, C. *Rarefied Gas Dynamics. Fundamentals, Simulations and Micro Flows*. Berlin: Springer, 2005.
- [15] SHARIPOV, F. *Rarefied gas dynamics and its applications to vacuum technology*. May 2006. CAS - CERN Accelerator School and ALBA Synchrotron Light Facility: Course on Vacuum in Accelerators, Platja d'Aro, Spain.

- [16] ZHANG K L, C. S. K.; ANG, S. S. Development of a solid propellant microthruster with chamber and nozzle etched on a wafer surface. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, n. 14, p. 785–792, 2004.
- [17] SHARIPOV, F. Encyclopedia of microfluidics and nanofluidics. In: _____. New York: Springer, 2008. cap. Micro- and Nanoscale Gas Dynamics, p. 1281–1287.
- [18] KARNIADAKIS, G. E.; BESKOK, A.; NARAYAN, A. *Microflows and Nanoflows - Fundamentals and Simulation*. New York: Springer-Verlag, 2005.
- [19] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Fluid Mechanics*. New York: Pergamon, 1989.
- [20] CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge: University Press, 1952.
- [21] FERZIGER, J. H.; KAPER, H. G. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1972.
- [22] KNUDSEN, M. Die molekularstromung der gase durch offnungen und die effusion. *Ann. Phys.*, v. 28, p. 999, 1909.
- [23] BRUSH, S. G.; HALL, N. *Kinetic Theory of Gases: An Anthology of Classic Papers With Historical Commentary*. London: Imperial College Press, 2003.
- [24] HERAPATH, J. On the physical properties of gases. *Annals of Philosophy*, VIII, p. 56–60, 1816.
- [25] WATERSTON, J. J. On the physics of media that are composed of free and perfectly elastic molecules in a state of motion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, v. 183, p. 1–79, 1892.
- [26] CLAUSIUS, R. Über die art der bewegung, die wir wärme nennen. *Annalen der Physik*, n. 100, p. 353–379, 1857.
- [27] NIVEN, W. D. (Ed.). *Scientific Papers of James Clerk Maxwell*. New York: Dover Publications, Inc., 1965.
- [28] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. *Sitzung Berichte Kaiserl. Akad. der Wissenschaften*, v. 66, n. 2, p. 275–370, 1872.
- [29] UMRATH, W. (Ed.). *Fundamentals of Vacuum Technology*. Colonia: Walter Umrath, 1998.
- [30] SCHAAF, S. A.; TALBOT, L. Mechanics of rarefied gases. In: LABORATORY, J. H. U. A. P. (Ed.). *Handbook of Supersonic Aerodynamics - Section 16*. New York: Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory, 1959. v. 5. [NAVORD REPORT 1488].
- [31] HAK, M. Gad-el. Flow physics in mems. *Mec. Ind.*, v. 2, p. 313–41, 2001.
- [32] HAK, M. Gad-el (Ed.). *The MEMS Handbook - MEMS Applications*. Boca Raton, Florida: Taylor & Francis Group, LLC, 2006.
- [33] CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge: University Press, 1970.

- [34] CERCIGNANI, C. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Edinburgh: Scottish Academic Press, 1975.
- [35] SHARIPOV, F.; SELEZNEV, V. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, v. 27, n. 3, p. 657–706, 1998.
- [36] JOUSTEN, K. (Ed.). *Handbook of Vacuum Technology*. Berlin: Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2008.
- [37] GIMELSHEIN, S.; MARKELOV, G.; RIEFFEL, M. *Collision Models in the Hawk DSMC Implementation*. Pasadena, California, 1996. [Technical Report CIT-TR-96-16].
- [38] ORAN, E. S.; OH, C. K.; CYBYK, B. Z. Direct simulation monte carlo: Recent advances and applications. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 30, p. 403–441, 1998.
- [39] GARCIA, A.; BARAS, F. Direct simulation monte carlo: Novel applications and new extensions. In: **THIRD WORKSHOP ON MODELLING OF CHEMICAL REACTION SYSTEMS**. Heidelberg, 1997.
- [40] DUWENSEE, M. et al. Direct simulation monte carlo method for the simulation of rarefied gas flow in discrete track recording head/disk interfaces. *J. Tribol.*, American Society of Mechanical Engineers, v. 131, n. 1, 2009.
- [41] ALEXEENKO, A. A. et al. Kinetic modeling of temperature driven flows in short microchannels. *Int. J. Thermal Science*, v. 45, p. 1045–1051, 2006.
- [42] ZHANG, Y. et al. Capturing Knudsen layer phenomena using a lattice Boltzmann model. *Phys. Rev.*, The American Physical Society, v. 74, n. 4, 2006.
- [43] JANSON, S. W.; HELVAJIAN, H. Mems, microengineering and aerospace systems. In: **30TH AIAA FLUID DYN. CONF.** Norfolk, Virginia, 1999.
- [44] MENG, G. et al. Micro-rotor dynamics for micro-electro-mechanical systems (mems). *Chaos, Solitons and Fractals*, Elsevier Ltd, v. 40, n. 2, p. 538–562, September 2009.
- [45] COOK, E. H. *A Carbon Nanotube Bearing and Stodola Rotor*. Dissertação (Mestrado) — University of Maryland, College Park, Maryland, <http://dspace.mit.edu>, september 2008.
- [46] CHOU, S. K. et al. Development of micro power generators - a review. *Applied Energy*, v. 88, p. 1–16, 2010.
- [47] HORISAWA, H. et al. Numerical simulation of micro-nozzle and micro-nozzle-array flowfield characteristics. *Vacuum*, Elsevier Ltd, v. 83, n. 1, p. 52–56, September 2008.
- [48] KOGAN, M. N. Kinetic theory in aerothermodynamics. *Prog. Aerospace Sci.*, v. 29, p. 271–354, 1992.
- [49] SHARIPOV, F. Direct simulation Monte Carlo method applied to aerothermodynamics. *J. Braz. Soc. Mechanical Sciences*, v. 23, n. 4, p. 441–452, 2001.
- [50] SHARIPOV, F. Hypersonic flow of rarefied gas near the Brazilian satellite during its reentry into atmosphere. *Brazilian J. Phys.*, v. 33, n. 2, p. 398–405, 2003.

- [51] SHARIPOV, F.; FAHRENBACH, P.; ZIPP, A. Numerical modeling of Holweck pump. *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 23, n. 5, p. 1331–1329, 2005.
- [52] SCHERER, C. S.; BARICHELLO, L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. III. Evaporation and condensation problems. *Z. Angew. Math. Phys.*, v. 61, n. 1, p. 95–117, February 2010.
- [53] MUNTZ, E. P. Rarefied gas dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 21, p. 387–422, January 1989.
- [54] MCCOY, B. J.; CHA, C. Y. Transport phenomena in the rarefied gas transition regime. *Chemical Engineering Science*, v. 29, n. 2, p. 381–488, February 1974.
- [55] GOBBERT, M. K.; CALE, T. S. Effect of the Knudsen number on transient times during chemical vapor deposition. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, v. 4, n. 3, p. 319–335, 2006.
- [56] GOBBERT, M. K.; CALE, T. S. Kinetic transport and reaction model and simulator for rarefied gas flow in the transition regime. *Journal of Computational Physics*, v. 213, p. 591–612, 2006.
- [57] JANSON, S. W.; HELVAJIAN, H. Numerical modeling of the heterogeneous combustion in a micro scale chemical reactor. In: 42ND AIAA AEROSPACE SCIENCES MEETING AND EXHIBIT. Reno, Nevada, 2004.
- [58] MATSUDA, T.; MIZUTANI, H. Application of DSMC method to astrophysical flows. *Astrophysical Supercomputing using Particle Simulations, IAU Symposium*, v. 208, p. 425–426, 2003.
- [59] SHARIPOV, F. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *J. Microtech. Microeng.*, v. 9, n. 4, p. 394–401, 1999.
- [60] NARIS, S. et al. Discrete velocity modelling of gaseous mixture flows in MEMS. *Superlattices and Microstructures*, v. 35, p. 629–643, 2004.
- [61] SONE, Y.; ONISHI, Y. Heat transfer through a rarefied gas between coaxial circular cylinders with large temperature difference. In: 10TH INT. SYMP. *Rarefied Gas Dynamics*. Aspen: Progress in Astronautics and Aeronautics, 1977. v. 51, p. 295–310.
- [62] SHARIPOV, F. M.; KREMER, G. M. On the frame-dependence of constitutive equations. i. heat transfer through a rarefied gas between two rotating cylinders. *Continuum Mech. Thermodyn.*, v. 7, n. 1, p. 57–72, 1995.
- [63] SHARIPOV, F.; BERTOLDO, G. Heat transfer through a rarefied gas confined between two coaxial cylinders with high radius ratio. *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 24, n. 6, p. 2087–2093, 2006.
- [64] LI, Z.; ZHANG, H. Kgas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *Journal of Computational Physics*, v. 228, p. 1116–1138, 2009.
- [65] SUN, Q.; BOYD, L. D.; CANDLER, G. V. A hybrid continuum/particle approach for modeling subsonic, rarefied gas flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier Ltd, v. 194, n. 1, p. 256–277, 2004.

- [66] LIU, H.; AONO, H. Size effects on insect hovering aerodynamics: an integrated computational study. *Bioinspiration and Biometrics*, IOP Publishing Ltd, v. 4, n. 1, 2009.
- [67] STECKELMACHER, W. Knudsen flow 75 years on: the current state of the art for flow of rarefied gases in tubes and systems. *Reports on Progress in Physics*, v. 49, n. 10, p. 1083–1107, 1986.
- [68] BIRD, G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Oxford University Press, 1994.
- [69] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and its Application*. New York: Springer-Verlag, 1988.
- [70] JAMISON, A. J.; KETSDEVER, A. D.; MUNTZ, E. P. Gas dynamic calibration of a nano-Newton thrust stand. *Rev. Sci. Instruments*, v. 73, n. 10, p. 3629–3637, 2002.
- [71] SAN O, B. I.; BAYRAKTAR, T. Size and expansion ratio analysis of micro nozzle gas flow. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, n. 36, p. 402–411, 2009.
- [72] ALEXEENKO, A. A. et al. Numerical and experimental study of orifice flow in the transition regime. *AIAA Paper 2001-3072*, 2001.
- [73] BORISOV, S. F. et al. Flow of rarefied gases through an orifice for small pressure drop. *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*, v. 43, n. 8, p. 1735–1739, 1973. [in Russian].
- [74] SHARIPOV, F. Rarefied gas flow into vacuum through a thin orifice. Influence of the boundary conditions. *AIAA Journal*, v. 40, n. 10, p. 2006–2008, 2002.
- [75] SHARIPOV, F. Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice. *J. Fluid Mech.*, v. 518, p. 35–60, 2004.
- [76] SHARIPOV, F. Aerothermodynamics of brazilian reusable satellite. In: HARRIS, R. A. (Ed.). *Aerothermodynamics for Space Vehicles*. Noordwijk, Netherlands: ESA Publications Division, 2002. p. 373–379.
- [77] SHARIPOV, F. DSMC simulation of hypersonic flow near the Brazilian reusable satellite. In: ZEITOUN, D. et al. (Ed.). *West East High Speed Flow Field*. Barcelona: Int. Center for Numerical Methods in Eng., 2003. p. 182–188.
- [78] DUSHMAN, S. *Scientific Foundation of Vacuum Technique*. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc, 1962.
- [79] ROTH, A. *Vacuum Technology*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1976.
- [80] AKTAS, O.; ALURU, N. R.; RAVAIOLI, U. Application of a parallel DSMC technique to predict flow characteristics in microfluidic filters. *J. Microelectromechanical Systems*, v. 10, n. 4, p. 538–549, 2001.
- [81] DANILATOS, G. D. Direct simulation Monte Carlo study of orifice flow. In: J, B. T.; GALLIS, M. A. (Ed.). *Rarefied Gas Dynamics*. Melville: American Institute of Physics, 2001. p. 924–932.

- [82] DANILATOS, G. D.; PHILLIPS, M. R.; NAILON, J. V. Electron beam current loss at the high-vacuum-high-pressure boundary in the environmental scanning electron microscope. *Microscopy & Microanalysis*, v. 7, n. 5, p. 397–406, 2001.
- [83] SZWEMIN, P.; SZYMAŃSKI, K.; JOUSTEN, K. Monte Carlo study of a new PTB primary standard for very low pressure. *Metrologia*, v. 36, p. 562–564, 1999.
- [84] JITSCHIN, W.; WEBER, U.; HARTMANN, H. K. Convenient primary gas flow meter. *Vacuum*, v. 46, p. 821–824, 1995.
- [85] JITSCHIN, W.; RONZHEIMER, M.; KHODABAKHSHI, S. Gas flow measurement by means of orifices and venturi tubes. *Vacuum*, v. 53, p. 181–185, 1999.
- [86] LIEPMANN, H. W. Gas kinetics and gas dynamics of orifice flow. *J. Fluid Mech.*, v. 10, p. 65–79, 1961.
- [87] NARASIMHA, R. Orifice flow of high Knudsen numbers. *J. Fluid Mech.*, v. 10, p. 371–384, 1961.
- [88] WILLIS, D. R. Mass flow through a circular orifice and a two-dimensional slit at high Knudsen numbers. *J. Fluid Mech.*, v. 21, p. 21–31, 1965.
- [89] ROTENBERG, A.; WEITZNER, H. Nearly free flow through an orifice. *Phys. Fluid.*, v. 12, n. 8, p. 1573–1581, 1969.
- [90] SHAKHOV, E. M. Solution of axisymmetrical problems of the rarefied gas theory by the method of finite differences. *Zhurnal Vychislitelnoj Matematiki i Matematicheskoy Fizicheski*, v. 14, p. 970–981, 1974. [in Russian].
- [91] ALDER, G. M. The numerical solution of choked and supercritical ideal gas flow through orifices and convergent conical nozzles. *J. Mech. Eng. Sci.*, v. 21, n. 3, p. 197–203, 1979.
- [92] ROSCOE, R. The flow of viscous fluid round plane obstacles. *Philos. Mag.*, v. 40, p. 338–351, 1949.
- [93] PERRY, J. A. J. Critical flow through sharp-edged orifices. *Trans. ASME*, v. 71, p. 757–764, 1949.
- [94] LINDEN, H. R.; OTHMER, D. F. Air flow through small orifices in the viscous region. *Trans. ASME*, v. 71, p. 765–772, 1949.
- [95] SREEKANTH, A. K. Transition flow through short circular tubes. *Phys. Fluids*, v. 8, n. 11, p. 1951–1956, 1965.
- [96] PORODNOV, B. T. et al. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J. Fluid Mech.*, v. 64, n. 3, p. 417–437, 1974.
- [97] BARASHKIN, S. T.; PORODNOV, B. T.; CHEMAGIN, M. F. Experimental investigation of flows and direction diagrams for outflow of gas into vacuum through capillaries of various lengths. *Zhurnal Prikladnoj Mekhaniki i Tekhnicheskoy Fiziki*, v. 4, p. 74–80, 1977. [in Russian].

- [98] BARASHKIN, S. T.; PORODNOV, B. T.; SUETIN, P. E. Outflow of gas into vacuum through an orifice. *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*, v. 47, p. 199–202, 1977. [in Russian].
- [99] FUJIMOTO, T.; USAMI, M. Rarefied gas flow through a circular orifice and short tubes. *J. Fluids Eng.-Tran. ASME*, v. 106, n. 4, p. 367–373, 1984.
- [100] STEWART, J. D. Mass flow rate for nearly-free molecular slit flow. *J. Fluid Mech.*, v. 35, n. 3, p. 599–608, 1969.
- [101] BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A. A model for collision processes in gases. *Phys. Rev.*, v. 94, p. 511–525, 1954.
- [102] HASEGAWA, M.; SONE, Y. Rarefied gas flow through a slit. *Phys. Fluids A*, v. 3, n. 3, p. 466–477, 1991.
- [103] WADSWORTH, D. C.; ERWIN, D. A. Numerical simulation of rarefied flow through a slit. part i: Direct simulation Monte Carlo results. *Phys. Fluids A*, v. 5, n. 1, p. 235–242, 1993.
- [104] CHUNG, C. H. et al. Numerical simulation of rarefied gas flow through a slit. *J. Thermophys. Heat Transfer*, v. 6, n. 1, p. 27–34, 1992.
- [105] AKINSHIN, V. D.; SELEZNEV, V. D.; SHARIPOV, F. M. Non-isothermal rarefied gas flow through a narrow slit. *Izvestia Akademii Nauk SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, v. 4, p. 171–175, 1990. [in Russian]. Translated in *Fluid Dynamics* **25**(4), 642–645 (1990).
- [106] SHARIPOV, F. Rarefied gas flow through a slit: Influence of the gas-surface interaction. *Phys. Fluids*, v. 8, n. 1, p. 262–268, 1996.
- [107] SHARIPOV, F. Non-isothermal rarefied gas flow through a slit. *Phys. Fluids*, v. 9, n. 6, p. 1804–1810, 1997.
- [108] SHAKHOV, E. M. *Method of Investigation of Rarefied Gas Flows*. Moscow: Nauka, 1974. [in Russian].
- [109] SAZHIN, O. Gas flow through a slit into a vacuum in a wide range of rarefaction. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 107, n. 1, p. 162–169, 2008.
- [110] SAZHIN, O. Gas molecule-molecule interaction and the gas-surface scattering effect on the rarefied gas flow through a slit into a vacuum. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 108, n. 5, p. 874–879, 2009.
- [111] SHARIPOV, F.; KOZAK, D. Rarefied gas flow through a thin slit into vacuum simulated by the Monte Carlo method over the whole range of the Knudsen number. *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 27, n. 3, p. 479–484, 2009.
- [112] HARRIS, R. A. (Ed.). *Aerothermodynamics for Space Vehicle*. 4th Eur. Symp., Netherlands: ESA Publications Division, 2002.
- [113] RAULT, D. F. G. Aerodynamics of the shuttle orbiter at high altitudes. *J. Spacecraft and Rockets*, v. 31, n. 6, p. 944–952, 1994.

- [114] KOPPENWALLNER, G. Low density aerodynamics of satellites. In: BELOTSEV-KOVSKII, O. M. et al. (Ed.). *Rarefied Gas Dynamics*. Novosibirsk, 1985. Vol 1, p. 385–399.
- [115] XU, K.; MAO, M.; TANG, L. A multidimensional gas-kinetic bgk scheme for hypersonic viscous flow. *Journal of Computational Physics*, v. 203, p. 405–421, 2005.
- [116] LEBeau, G. J.; Lumpkin III, F. E. Application highlights of the DSMC analysis code (DAC) software for simulating rarefied gas flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v. 191, p. 595–609, 2001.
- [117] SANTOS, W. F. N. Effects of compressibility on aerodynamic surface quantities over low-density hypersonic wedge flow. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 28, n. 3, p. 362–372, 2006.
- [118] SANTOS, W. F. N. Simulation of blunt leading edge aerothermodynamics in rarefied hypersonic flow. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 29, p. 123–135, 2007.
- [119] SALAS, M. A review of hypersonics aerodynamics, aerothermodynamics and plasmadynamics activities within nasa’s fundamental aeronautics program. *AIAA Paper 2007-4264*, 2007.
- [120] MAXWELL, J. C. Illustrations of the dynamical theory of gases. *Philosophical Magazine*, Elsevier Ltd, v. 19,20, p. 19–32,21–37, 1860.
- [121] SHARIPOV, F. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, v. 21, n. 1, p. 113–123, 2002.
- [122] SHARIPOV, F. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, v. 22, p. 133–143, 2003.
- [123] SHARIPOV, F. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. III. Poiseuille flow and thermal creep through a long tube. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, v. 22, p. 145–154, 2003.
- [124] KALEMPA, D. *Modelagem Numérica de Propagação de Ondas em Gases Rarefeitos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, Curitiba-PR, Brasil, 2009.
- [125] CERCIGNANI, C.; LAMPIS, M. Kinetic model for gas-surface interaction. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, v. 1, p. 101–114, 1971.
- [126] KREMER. *Uma Introdução à Equação de Boltzmann*. São Paulo, SP: EDUSP, 2005.
- [127] SHAKHOV, E. M. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, v. 3, n. 5, p. 95–96, 1968.
- [128] BERTOLDO, G. *Solução numérica da equação de Boltzmann linearizada com base no potencial de Lennard-Jones. Escoamento de Poiseuille e raspagem térmico*. Dissertação (Mestrado) — Pós Graduação em Física, UFPR, http://fisica.ufpr.br/sharipov/bertoldo_dis.pdf, fevereiro 2009.

- [129] SHARIPOV, F. Modeling and calculations of gas flows in microfluidics: Dsmc vs kinetic equation. In: 1ST EUR. CONF. ON MICROFLUIDICS - MICROFLUIDICS 2008. Bologna, Italy, 2008.
- [130] FISHMAN, G. S. *Monte Carlo - Concept, Algorithms and Applications*. [S.l.]: Springer, 1996.
- [131] GENTLE, J. E. *Random Number Generation and Monte Carlo Methods*. 2. ed. [S.l.]: Springer, 2003.
- [132] METROPOLIS, N.; ULAM, S. The monte carlo method. *J. of The Amer. Stat. Assoc.*, v. 44, n. 247, p. 335–341, 1947.
- [133] BIRD, G. A. *Molecular Gas Dynamics*. Oxford: Clarendon Press, 1976.
- [134] NAKARJAKOV, A. V. et al. The effect of the surface composition on a free - molecular gas flow in a cylindrical channel. In: SHIZGAL, B. D.; WEAVER, D. P. (Ed.). *Rarefied Gas Dynamics*. Oxford: Oxford University Press, 1995. v. 2, p. 954–959.
- [135] SAZHIN, O. V.; BORISOV, S. F.; SHARIPOV, F. Accommodation coefficient of tangential momentum on atomically clean and contaminated surfaces. *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 19, n. 5, p. 2499–2503, 2001. Erratum: **20** (3), 957 (2002).
- [136] PRASANTH, P. S.; KAKKASSERY, J. K. Molecular models for simulation of rarefied gas flows using direct simulation monte carlo method. *Fluid Dynamics Research*, v. 40, p. 233–252, 2008.
- [137] KOURA, K.; MATSUMOTO, H. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, v. 3, n. 10, 1991.
- [138] HASSAN, H. A.; HASH, D. B. A generalized hard-sphere model for monte carlo simulations. *Physics of Fluids A*, v. 5, p. 738–744, 1993.
- [139] FAN, J. A generalized soft-sphere model for monte carlo simulation. *Phys. Fluids*, v. 14, p. 4399–4405, 2002.
- [140] MATSUMOTO, H. Variable sphere molecular model for inverse power law and Lennard-Jones potentials in monte carlo simulations. *Phys. Fluids*, v. 14, p. 4256–4265, 2002.
- [141] PRASANTH, P. S.; KAKKASSERY, J. K. Direct simulation monte carlo (dsmc) a numerical method for transition-regime flows - a review. *J. Indian Inst. Sci.*, v. 86, p. 169–192, May-june 2006.
- [142] MARKELOV, G. N.; KUDRYAVTSEV, A. N.; IVANOV, M. S. Numerical modeling of near-continuum hypersonic flow about a hollow cylinder flare. In: BRUN, R. et al. (Ed.). *Rarefied Gas Dynamics*. Toulouse: CEPAD, 1999. v. 2, p. 647–654.
- [143] ATKINS, P. W. *Physical Chemistry*. 6. ed. Oxford: Oxford University Press, 1998.

- [144] KOZAK, D. V. *Método integral aplicado ao cálculo do ponto de separação e pressão de base de cunhas inclinadas em escoamento supersônico*. Dissertação (Mestrado) — Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Dezembro 1992.
- [145] KOZAK, D. V.; MORAES, P. Preliminary aerodynamic design of aerospace configuration using AEROCAD. In: 19TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SPACE TECHNOLOGY AND SCIENCE. Yokohama (Japan), 1994.
- [146] IVANOV, M. S.; GIMELSHEIN, S. F. Computational hypersonic rarefied flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 30, p. 469–505, 1998.
- [147] CERCIGNANI, C.; LAMPIS, M. Applications of a new model for the differential cross-section of a classical polyatomic gas. *Journal Transport Theory and Statistical Physics*, v. 29, p. 355–373, april 2000.
- [148] HAAS, B. L. et al. Rates of thermal relaxation in direct simulation Monte Carlo methods. *Phys. Fluids*, v. 6, n. 6, p. 2191–2201, 1994.
- [149] BOYD, I. D. Analysis of rotational nonequilibrium in standing shock waves of nitrogen. *AIAA Journal*, v. 28, p. 1997–1999, 1990.
- [150] BOYD, I. D. Rotational-translational energy transfer in rarefied nonequilibrium flows. *Physics of Fluids*, A2, p. 447–452, 1990.
- [151] BOYD, I. D. Relaxation of discrete rotational energy distributions using a monte carlo method. *Physics of Fluids*, A5, p. 2278–2286, 1993.
- [152] BOYD, I. D. Temperature dependence of rotational relaxation in shock waves of nitrogen. *J. Fluid Mech.*, n. 246, p. 343–360, 1993.

APÊNDICE A – Modelo de Larsen-Borgnakke

A.1 Resumo do Modelo

O modelo de Larsen-Borgnakke (MLB) tem sido amplamente utilizado para análise da transferência de energia, em seus diversos modos, durante a colisão binária de moléculas poliatômicas [136, 146, 147]. Trata-se de um modelo fenomenológico onde a idéia central é a conservação da energia colisional, a qual compreende a energia cinética e a energia interna do par de partículas. A partir da distribuição de probabilidade da energia relativa translacional, função da velocidade relativa entre as partículas, e da distribuição de probabilidade da energia interna combinada das duas partículas, o modelo propõe uma distribuição de probabilidade para um valor particular da energia translacional como função da razão entre a energia translacional e a energia colisional. Desta forma, de posse desta relação e usando o critério de aceitação-rejeição, é possível determinar de forma estatística como é a distribuição de energia após uma colisão entre o modo translacional e os modos de energia interna mantendo constante a energia colisional (conservação de energia).

Sendo a energia translacional relativa, E_t , e a energia interna combinada (modos rotacional, translacional, etc.), E_i , do par de partículas dadas, respectivamente, por (Bird [68])

$$E_t = \frac{1}{4}mv_r^2 \quad (\text{A.1})$$

e

$$E_i = \epsilon_{i,1} + \epsilon_{i,2}, \quad (\text{A.2})$$

onde v_r é a velocidade relativa entre as partículas e $\epsilon_{i,j}$ é a energia interna da partícula j ($j = 1$ ou 2), a energia total da colisão, ou energia colisional, é definida como

$$E_c = E_t + E_i. \quad (\text{A.3})$$

A probabilidade de um determinado valor para a energia translacional após a colisão

é dada por

$$P = CE_t^{3/2-\omega}(E_c - E_t)^{\zeta-1}, \quad (\text{A.4})$$

onde ω é o expoente da lei de viscosidade, ζ é o número de graus de liberdade associado aos modos de energia interna e C é uma constante.

O máximo valor dessa probabilidade ocorre para

$$\frac{E_t}{E_c} = \frac{3/2 - \omega}{\zeta + 1/2 - \omega} \quad (\text{A.5})$$

e é

$$P_{max} = C(3/2 - \omega)^{3/2-\omega}(\zeta - 1)^{\zeta-1} [(\zeta + 1/2 - \omega)E_c]^{\zeta+1/2-\omega}. \quad (\text{A.6})$$

A razão entre a probabilidade P e a probabilidade máxima P_{max} é, portanto,

$$\frac{P}{P_{max}} = \left[\frac{\zeta + 1/2 - \omega}{3/2 - \omega} \left(\frac{E_t}{E_c} \right) \right]^{3/2-\omega} \left[\frac{\zeta + 1/2 - \omega}{\zeta - 1} \left(1 - \frac{E_t}{E_c} \right) \right]^{\zeta-1}. \quad (\text{A.7})$$

Um valor pós-colisional para a energia translacional relativa, E_t^* , é escolhido aleatoriamente entre 0 e E_c ($E_t^* = R_f E_c$), e o critério de aceitação-rejeição é aplicado utilizando-se a probabilidade relativa dada pela expressão (A.7), ocorrendo a aceitação quando $P/P_{max} > R_f$.

Definida a energia translacional pós-colisional, como a energia colisional é conservada, a energia interna combinada pós-colisional, E_i^* , é obtida utilizando-se

$$E_i^* = E_c - E_t^*. \quad (\text{A.8})$$

O próximo passo é distribuir a energia interna combinada entre as duas partículas, e esta distribuição obedece a seguinte probabilidade relativa,

$$\left(\frac{P}{P_{max}} \right)_i = 2^{\zeta-2} \left(\frac{\epsilon_{i,1}^*}{E_i^*} \right)^{\zeta/2-1} \left(1 - \frac{\epsilon_{i,1}^*}{E_i^*} \right)^{\zeta/2-1}. \quad (\text{A.9})$$

Um valor pós-colisional para a energia interna da partícula 1, $\epsilon_{i,1}^*$, é escolhido aleatoriamente entre 0 e E_i^* ($\epsilon_{i,1}^* = R_f E_i^*$), e o critério de aceitação-rejeição é aplicado utilizando-se a probabilidade relativa dada pela expressão (A.9), ocorrendo a aceitação quando $(P/P_{max})_i > R_f$.

A energia interna pós colisional da partícula 2, $\epsilon_{i,2}^*$, é

$$\epsilon_{i,2}^* = E_i^* - \epsilon_{i,1}^*. \quad (\text{A.10})$$

Para o caso particular de um gás diatômico, pode-se considerar apenas dois graus de liberdade para a energia interna, uma vez que um grau em rotação e os graus em vibração podem ser desprezados (vide considerações da seção *Etapa 3 - Colisões Intermoleculares*, pág.80). Assim, $\varsigma = 2$, e as expressões (A.7) e (A.9) se reduzem a

$$\frac{P}{P_{max}} = \left[\frac{5/2 - \omega}{3/2 - \omega} \left(\frac{E_t}{E_c} \right) \right]^{3/2 - \omega} \left[(5/2 - \omega) \left(1 - \frac{E_t}{E_c} \right) \right] \quad (\text{A.11})$$

e

$$\left(\frac{P}{P_{max}} \right)_i = 1. \quad (\text{A.12})$$

A expressão (A.11) corresponde à expressão (2.94), e a expressão (A.12) significa que a probabilidade de um valor pós-colisional para a energia interna da partícula 1, $\epsilon_{i,1}^*$, é constante, e assim um valor dessa energia pode ser escolhido aleatoriamente entre 0 e E_i^* e utilizado, conforme feito na expressão (2.97).

As equações precedentes podem ser assim utilizadas para a análise numérica de escoamentos utilizando técnicas como DSMC. Entretanto, existe um aspecto importante a considerar, que é o tempo de relaxação [68, 136]; este é tempo requerido para o gás entrar em equilíbrio, ou seja, o tempo para os diversos modos de energia atingirem as correspondentes distribuições de equilíbrio na nova condição do escoamento. Embora as colisões no MLB sejam inelásticas, se todas forem assim consideradas em uma simulação numérica o tempo de relaxação obtido será muito menor que o observado no processo físico real. A solução para adequar os resultados da aplicação do MLB ao observado em gases reais é considerar que apenas parte das colisões são inelásticas durante o tempo médio entre as colisões das moléculas, sendo as outras colisões consideradas elásticas. Esta fração de colisões inelásticas, X_{inel} , está associada ao tempo de relaxação, τ , que geralmente é várias vezes maior que o tempo médio entre as colisões. Para a energia rotacional, o tempo de relaxação é definido como (vide relação 2.101)

$$\tau_R = \frac{Z_R}{\nu}, \quad (\text{A.13})$$

onde τ_R é o tempo de relaxação rotacional, Z_R é o número colisional de relaxação rotacional e ν é a frequência das colisões. A fração de colisões inelásticas é então definido como (vide relação 2.102)

$$X_{inel} = \frac{1}{Z_R}. \quad (\text{A.14})$$

Usando o critério de aceitação-rejeição, e adotando a probabilidade de colisão inelástica com sendo igual X_{inel} (aceitação para $X_{inel} > R_f$), determina-se se a colisão será

considerada inelástica ou elástica. Para aplicação do método DSMC em problemas de engenharia, como neste trabalho, o valor $Z_R = 5$ é geralmente adotado para o caso do nitrogênio, vide Shen [14], o que corresponde a $X_{inel} = 0.2$.

Entretanto, se uma análise mais precisa ou detalhada é necessária, além de uma análise de engenharia, é necessário considerar a existência da dependência do número colisional de relaxação rotacional em relação à temperatura ou energia translacional, de forma que Z_R não é constante e varia com esses parâmetros. Alguns autores propuseram expressões para Z_R como função da temperatura ou energia translacional ($Z_R(T)$ ou $Z_R(E_r)$), vide Hass et al [148] e Boyd [149, 150, 151, 152].

APÊNDICE B – Seções Transversais de Colisão

B.1 Coeficientes de Transporte em Gases

De acordo com a teoria de transporte para gases não uniformes apresentada por Chapman & Cowling [21, 33], a primeira aproximação do coeficiente de viscosidade μ à temperatura T para um gás simples (uma única espécie química) é dada por

$$\mu = \frac{5kT}{8\Omega^{(2,2)}}, \quad (\text{B.1})$$

e a primeira aproximação para o coeficiente de autodifusão D é dada por

$$D = \frac{3kT}{8nm\Omega^{(1,1)}}, \quad (\text{B.2})$$

onde n é a densidade numérica e m é a massa da partícula.

Define-se a quantidade integral $\Omega^{(r,l)}$ como

$$\Omega^{(r,l)} = \left(\frac{kT}{\pi m}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty e^{-mv_r^2/(4kT)} [mv_r/\sqrt{4kT}]^{(2r+3)} Q^{(l)} dv_r, \quad (\text{B.3})$$

onde v_r é o módulo da velocidade relativa entre as partículas, e a quantidade $Q^{(l)}$ é calculada como

$$Q^{(l)} = 2\pi \int [1 - \cos^l \chi(b, v_r)] b db. \quad (\text{B.4})$$

que possui unidade de área, b é um parâmetro de impacto e χ o ângulo de espalhamento definidos conforme a Figura 72, sendo $\chi = \chi(b, v_r)$.

Substituindo as expressões (B.3) e (B.4) nas expressões (B.1) e (B.2) obtém-se

$$\mu = \frac{\frac{5}{8}\sqrt{\pi m k T}}{\left(\frac{m}{4kT}\right)^4 \int_0^\infty \sigma_\mu v_r^7 e^{-mv_r^2/(4kT)} dv_r} \quad (\text{B.5})$$

e

$$D = \frac{\frac{5}{8n} \sqrt{\frac{\pi kT}{m}}}{\left(\frac{m}{4kT}\right)^3 \int_0^\infty \sigma_M v_r^5 e^{-mv_r^2/(4kT)} dv_r}. \quad (\text{B.6})$$

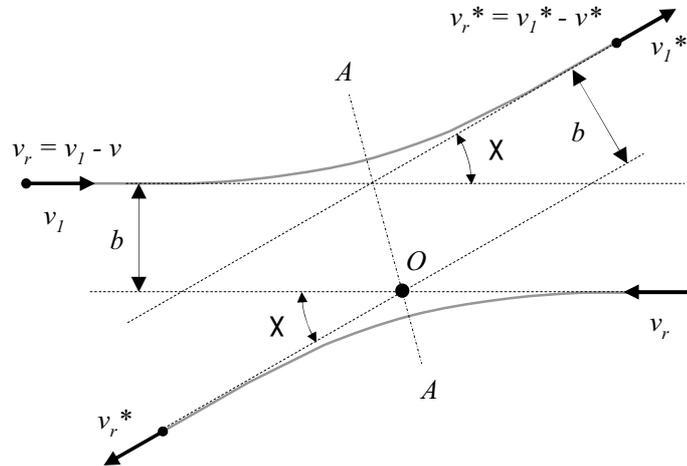


Figura 72: Colisão binária - parâmetro de impacto b e ângulo de espalhamento χ .

Nas expressões (B.5) e (B.6) aparecem as quantidades σ_μ e σ_M , que são dadas, respectivamente, por

$$\sigma_\mu = Q^{(2)} = 2\pi \int [1 - \cos^2 \chi(b, v_r)] b db = 2\pi \int \text{sen}^2 \chi(b, v_r) b db \quad (\text{B.7})$$

e

$$\sigma_M = Q^{(1)} = 2\pi \int [1 - \cos \chi(b, v_r)] b db. \quad (\text{B.8})$$

O parâmetro σ_μ denomina-se seção transversal de viscosidade, e σ_M é a seção transversal de difusão ou de transferência de momento. Para que tanto o coeficiente de viscosidade μ como o de difusão D possam ser calculados é necessário conhecer os valores destas áreas, as quais, para serem obtidas, implicam em se ter conhecida a relação funcional $\chi = \chi(b, v_r)$, que por sua vez depende do potencial de interação molecular adotado.

B.2 Modelos de Colisão e as Áreas Transversais

Como visto na seção anterior, o cálculo das seções transversais σ_μ e σ_M está vinculado ao conhecimento da relação funcional do ângulo de espalhamento χ com o parâmetro de impacto b e a velocidade relativa v_r entre as partículas que colidem. O que os diversos modelos de colisão fazem são hipóteses sobre esta dependência funcional com a consideração dos diversos potenciais de interação molecular.

APÊNDICE C – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento através da Fenda

C.1 Principais Parâmetros

Os parâmetros geométricos que definem o tamanho e a discretização da grade de células utilizada na simulação do escoamento através da fenda estão definidos na Figura 73. A Tabela 14 apresenta a descrição dos parâmetros cuja influência é analisada neste apêndice.

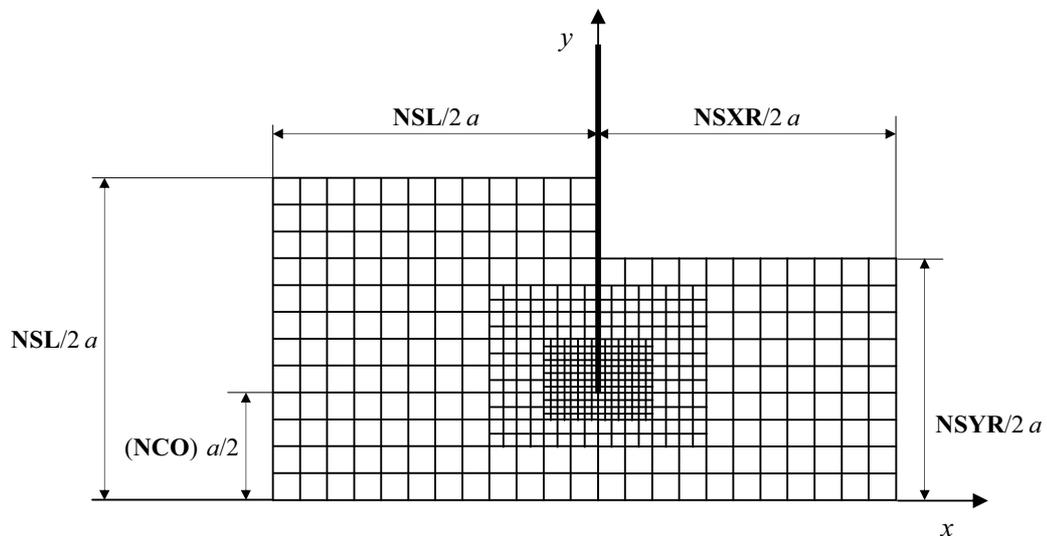


Figura 73: Parâmetros geométricos que definem a grade de células.
(a é a altura de fenda)

Tabela 14: Descrição dos parâmetros da simulação numérica do escoamento através da fenda.

Parâmetro	Descrição
DTM	Intervalo de tempo adimensional utilizado na simulação, Δt .
INM	Número inicial de partículas modelo.
NCO	Número de células na direção vertical entre o plano de simetria e a borda da fenda.
NSXR	Extensão do campo de escoamento na direção x à jusante da fenda.
NSYR	Extensão do campo de escoamento na direção y à jusante da fenda.
NSL	Extensão do campo de escoamento nas direções x e y à montante da fenda.

C.2 Influência dos Diversos Parâmetros

A influência do número inicial de partículas modelo, INM, utilizado no cálculo do fluxo de massa adimensional, W , pode ser observada na Tabela 15 para vários níveis de rarefação e para $p_1/p_0 = 0.0$ e 0.7 , que são casos extremos da razão de pressão. Nota-se que, para INM em torno de $30 \cdot 10^6$, valor utilizado no cálculo dos pontos da curva $W \times \delta$, Figura 42, a variação numérica de W é menor do que 1%, da mesma ordem de grandeza da flutuação estatística conforme estabelecida pela expressão (3.13).

Tabela 15: Influência do número inicial de partículas modelo, INM, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$.

p_1/p_0	DEL	INM/ 10^6	NCO	NSXR	NSYR	NSL	W	ΔW
0.0	0.1	10	12	8	8	16	1.016	0.1%
	0.1	30	12	8	8	16	1.017	
	10	10	12	8	8	8	1.406	0.1%
	10	20	12	8	8	8	1.407	
	100	10	12	8	8	8	1.503	0.0%
	100	20	12	8	8	8	1.503	
	1000	20	20	8	8	8	1.492	0.1%
	1000	30	20	8	8	8	1.493	
0.7	0.01	30	20	40	40	40	0.3030	0.1%
	0.01	37	20	40	40	40	0.3026	
	10	28	20	40	40	60	0.9403	0.7%
	10	70	20	40	40	60	0.9336	
	1000	26	20	40	20	40	1.135	0.1%
	1000	50	20	40	20	40	1.137	

O nível de discretização da grade de células, definido através do parâmetro NCO, para uma dada dimensão do campo de escoamento (parâmetros NSL, NSXR e NSYR), tem sua influência ilustrada na Tabela 16 para vários níveis de rarefação e $p_1/p_0 = 0.0$. Nota-se

que, para os valores de NCO utilizados, a variação do valor do fluxo de massa W é cerca de uma ordem de grandeza menor que a flutuação estatística esperada. O valor NCO=20 foi o utilizado no cálculo de W .

Tabela 16: Influência do nível de discretização, definido através de NCO, no cálculo fluxo de massa adimensional W através da fenda; $p_1/p_0 = 0.0$ e $DTM(\Delta t)=0.01$.

DEL	INM/ 10^6	NCO	NSXR	NSYR	NSL	W	ΔW
0.1	26	12	8	8	20	1.017	0.1%
0.1	26	20	8	8	20	1.018	
1	25	12	8	8	20	1.130	0.1%
1	25	40	8	8	20	1.129	
10	25	12	8	8	20	1.455	0.1%
10	25	20	8	8	20	1.454	
100	30	20	8	8	20	1.547	0.1%
100	30	40	8	8	20	1.545	
1000	20	20	8	8	8	1.492	0.1%
1000	20	12	8	8	8	1.493	

A influência do tamanho do campo à jusante, definido pelos parâmetros NSXR e NSYR, pode ser visto na Tabela 17. Para razões de pressão menores é de se esperar que esta influência seja baixa pois, fazendo analogia com o caso contínuo, quando, para $p_1/p_0 \leq 0.5$ a 0.6, ocorre o “entupimento da fenda” (escoamento crítico ou sônico, vide Shapiro [9]), e a configuração do escoamento à jusante não influencia o fluxo de massa através da fenda. Para razões de pressão maiores, $p_1/p_0 = 0.7$, a influência da configuração do escoamento à jusante é mais perceptível, como no caso contínuo, onde o escoamento passa a ser apenas subsônico. Mesmo assim, para o cálculo do escoamento através da fenda, os resultados da referida tabela indicam uma variação numérica de W da mesma ordem de grandeza da flutuação estatística, cerca de 1%, para NSXR=40 e NYR=60, valores efetivamente utilizados nos cálculos.

O tamanho do campo à montante, definido pelo parâmetro NSL, tem sua influência mostrada através da Tabela 18. Ao contrário do cálculo do escoamento através de orifícios, onde a área da seção do escoamento varia com o quadrado da distância ao eixo (raio), no caso da fenda esta variação é linear. Assim, para se garantir condições de contorno consistentes à montante, ou seja, escoamento não perturbado nas fronteiras, estas devem definir uma área de chegada suficientemente maior que a área da fenda, que implica em “raios” maiores quando comparados ao escoamento axissimétrico através de orifícios. Tal área é proporcional ao produto $NSL \times NSL$. Observando a Tabela nota-se que para $NSL \geq (\approx 40)$ a variação numérica de W é da mesma ordem de grandeza da flutuação

estatística, cerca de 1%. No cálculo de W o valor efetivamente utilizado foi $NSL=60$.

Tabela 17: Influência do tamanho do campo à jusante, $NSXR \times NSYR$, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$.

P1/P0	DEL	INM/10 ⁶	NCO	NSXR	NSYR	NSL	W	ΔW
0.0	1	20	20	8	8	40	1.141	0.2%
	1	20	20	20	20	40	1.139	
	100	20	20	8	8	40	1.560	0.1%
	100	20	20	20	20	40	1.558	
	1000	20	20	8	8	20	1.537	0.1%
	1000	20	20	20	20	20	1.536	
0.7	1	20	20	20	20	60	0.3939	1.5%
	1	20	20	40	40	60	0.3997	
	1000	33	20	20	20	60	1.129	1.2%
	1000	36	20	40	20	60	1.143	
	1000	50	20	40	20	40	1.137	0.4%
	1000	50	20	60	20	40	1.142	

Em todos os cálculos o intervalo de tempo adimensional utilizado foi $\Delta t = 0.01$, uma vez que intervalos menores não implicam em alteração perceptível na precisão do cálculo, conforme sugere a Tabela 19.

Dessas tabelas pode-se observar que, para as faixas de valores utilizadas para os diversos parâmetros, a variação do fluxo de massa adimensional, W , se situa em torno de $\pm 1\%$, da mesma ordem de grandeza da flutuação estatística estabelecida pela expressão (3.13).

Tabela 18: Influência do tamanho do campo à montante, $NSL \times NSL$, no cálculo do fluxo de massa adimensional W através da fenda; $DTM(\Delta t)=0.01$.

P1P0	DEL	INM/ 10^6	NCO	NSXR	NSYR	NSL	W	ΔW
0.0	0.01	25	12	8	8	20	1.001	0.1%
	0.01	25	12	8	8	30	1.002	
	0.1	26	20	8	8	40	1.022	0.3%
	0.1	26	20	8	8	60	1.025	
	1	20	20	20	20	40	1.139	0.6%
	1	20	20	20	20	60	1.146	
	10	25	20	8	8	20	1.455	0.6%
	10	25	20	8	8	28	1.464	
	10	30	12	8	8	40	1.469	0.7%
	10	30	12	8	8	80	1.479	
	100	20	12	8	8	40	1.563	0.2%
	100	20	12	8	8	60	1.566	
	1000	20	20	8	8	30	1.542	0.3%
	1000	20	20	8	8	60	1.546	
0.7	1	37	20	40	20	40	0.394	0.7%
	1	35	20	40	20	60	0.397	
	100	30	20	20	20	20	1.129	1.0%
	100	30	20	20	20	40	1.141	
	1000	35	20	20	20	40	1.132	0.2%
	1000	33	20	20	20	60	1.129	

Tabela 19: Influência do intervalo de tempo adimensional, $DTM (\Delta t)$, no fluxo de massa adimensional W através da fenda; $p_1/p_0 = 0$; ΔW é a variação de W para cada valor de δ (DEL).

DEL	INM	DTM	NCO	NSXR	NSYR	NSL	W	ΔW
0,1	25	0.010	12	8	8	20	1.017	0.0%
0,1	25	0.002	12	8	8	20	1.017	
1	25	0.010	20	8	8	20	1.129	0.0%
1	25	0.002	20	8	8	20	1.129	
10	25	0.010	20	8	8	20	1.455	0.0%
10	25	0.002	20	8	8	20	1.455	
100	20	0.010	20	8	8	20	1.545	0.1%
100	30	0.002	20	8	8	20	1.547	
1000	28	0.010	20	8	8	20	1.534	0.1%
1000	30	0.002	20	8	8	20	1.533	

C.3 Número de Partículas Modelo por Célula

Na Tabela 20 são mostrados exemplos das quantidades de partículas modelo por célula em algumas simulações do escoamento através da fenda.

Tabela 20: Quantidade de partículas modelo por célula.

p_1/p_0	δ	Quantidade		
		Mínima	Máxima	Média
0.1	0.01	2	230	19
	1000	1	244	20
0.5	0.01	6	177	33
	1000	5	183	34

A Figura 74 mostra as regiões do escoamento onde os valores mínimo e máximo da quantidade de partículas por célula foram encontrados.

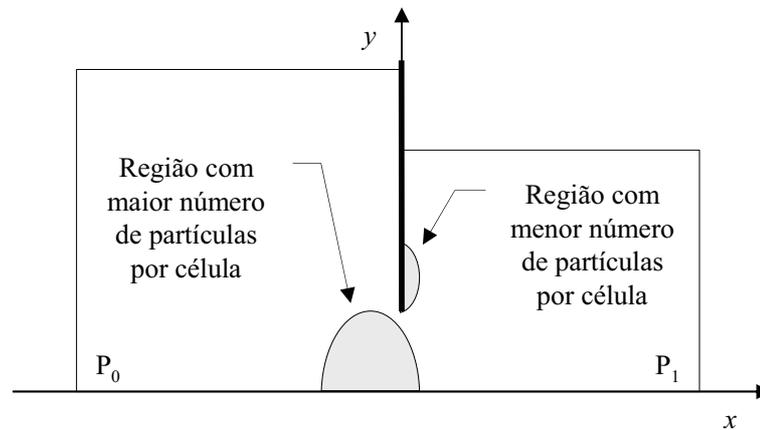
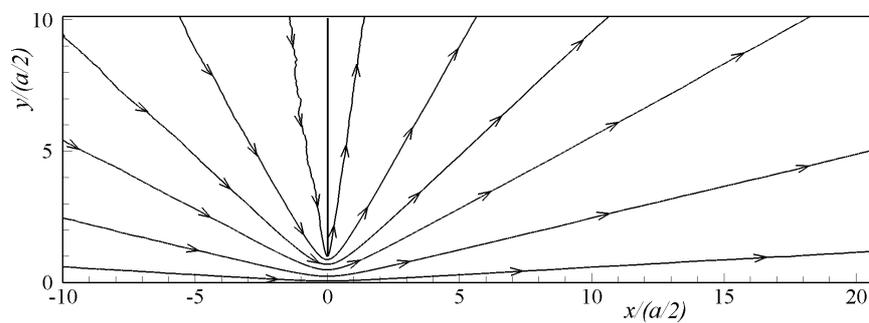


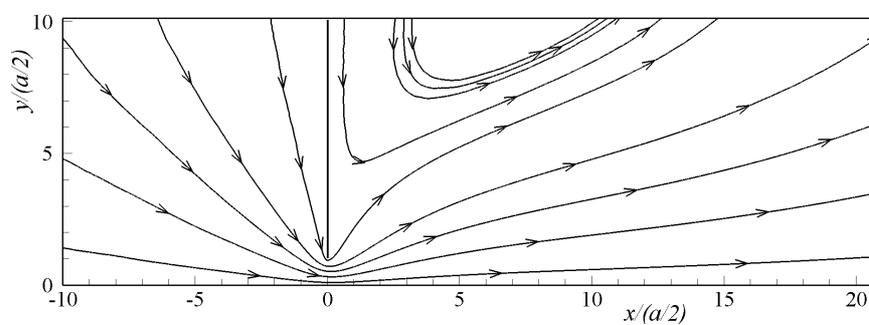
Figura 74: Regiões com menor e maior concentração de partículas modelo por célula.

*APÊNDICE D – Campo de Escoamento
através da Fenda*

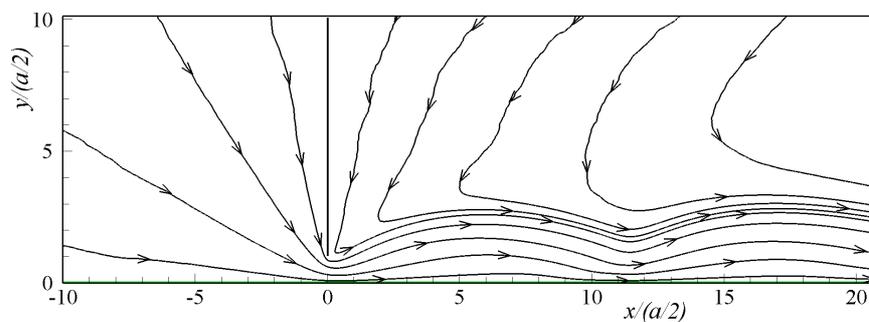
D.1 Linhas de Corrente



(a)

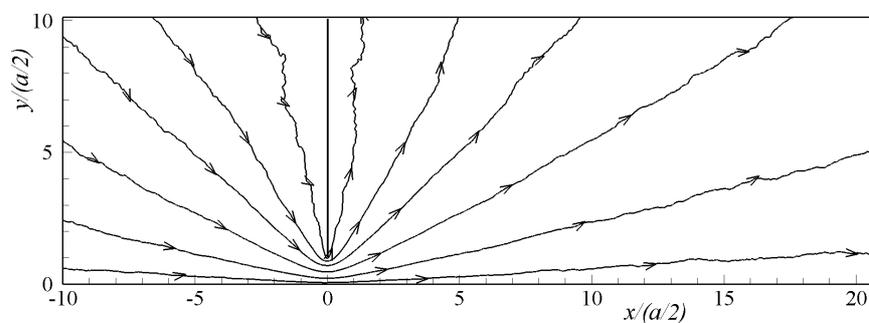


(b)

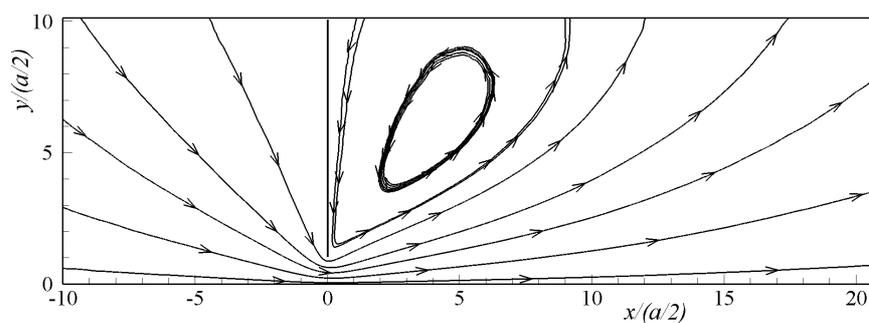


(c)

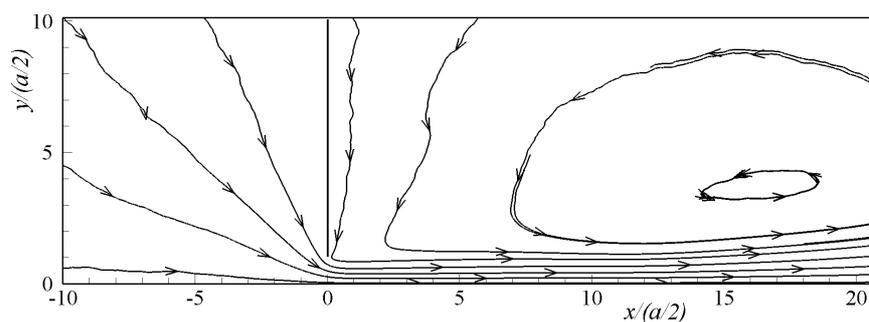
Figura 75: Linhas de corrente para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).



(a)



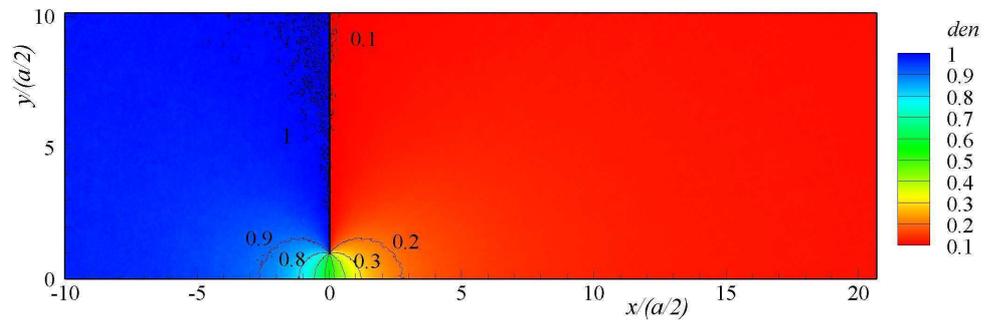
(b)



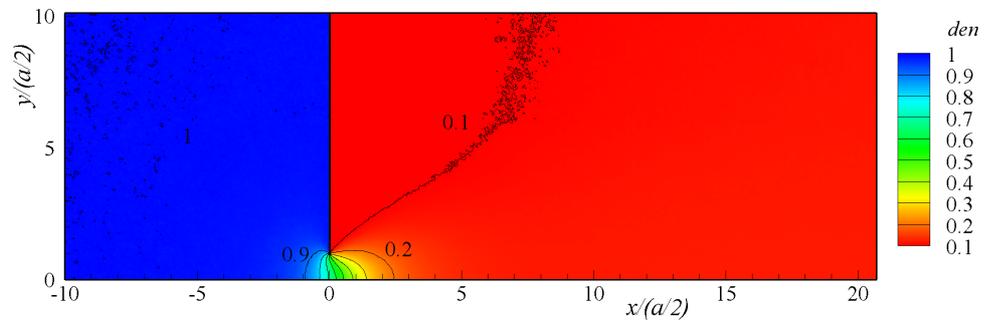
(c)

Figura 76: Linhas de corrente para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).

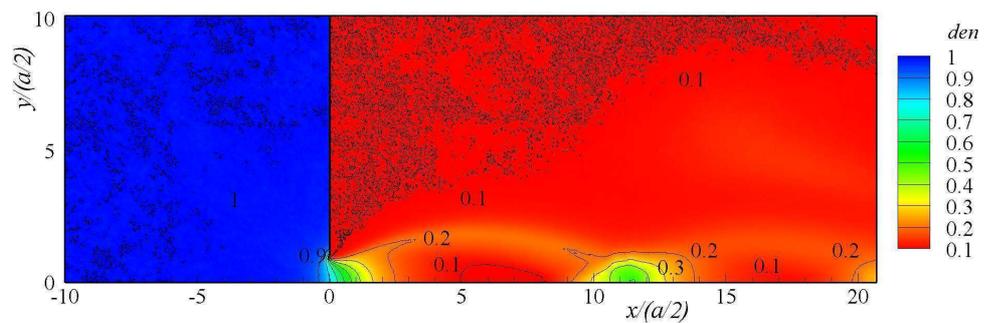
D.2 Campo de Densidade



(a)

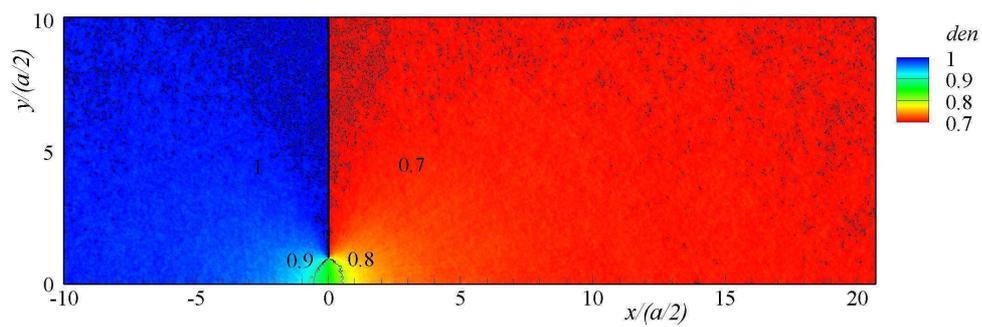


(b)

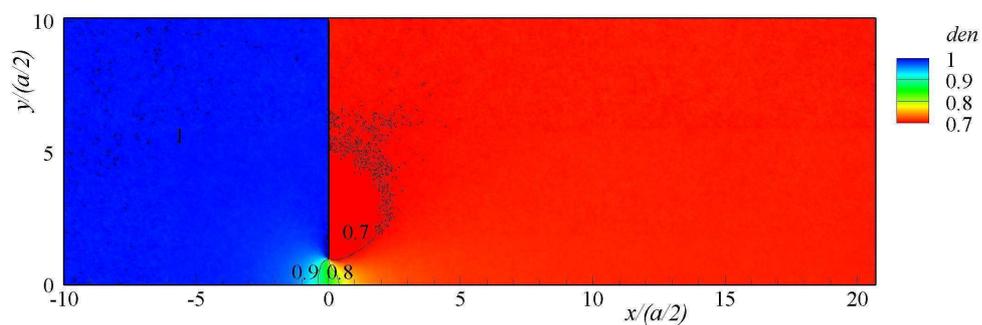


(c)

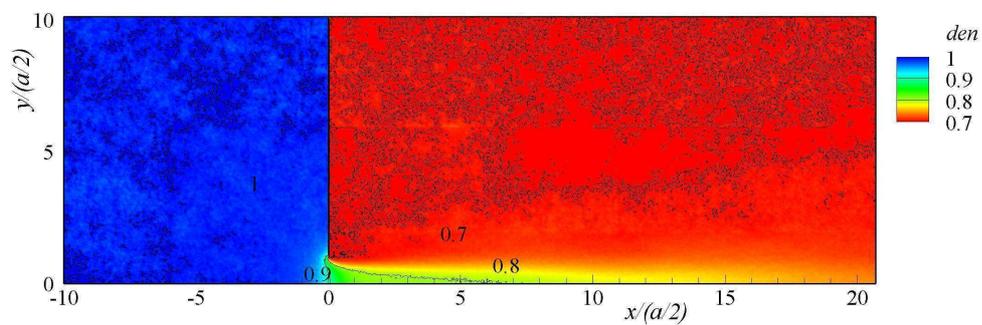
Figura 77: Campo de densidade ($\text{den}=\rho/\rho_0$) para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).



(a)



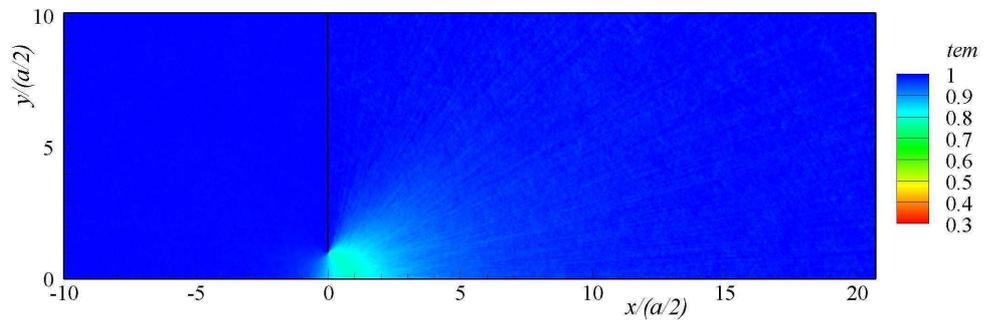
(b)



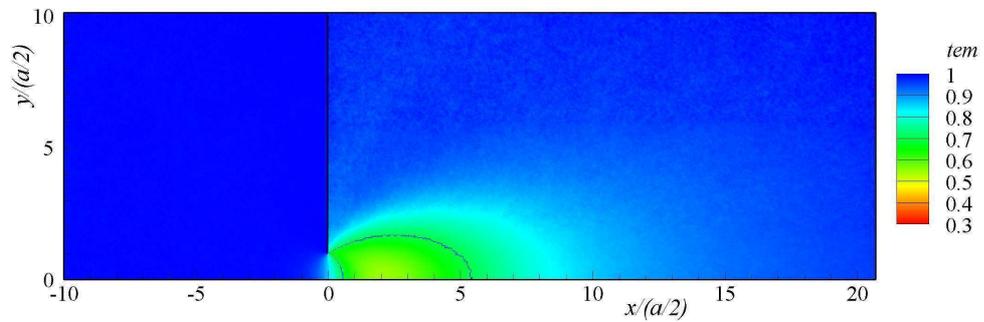
(c)

Figura 78: Campo de densidade ($den = \rho/\rho_0$) para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).

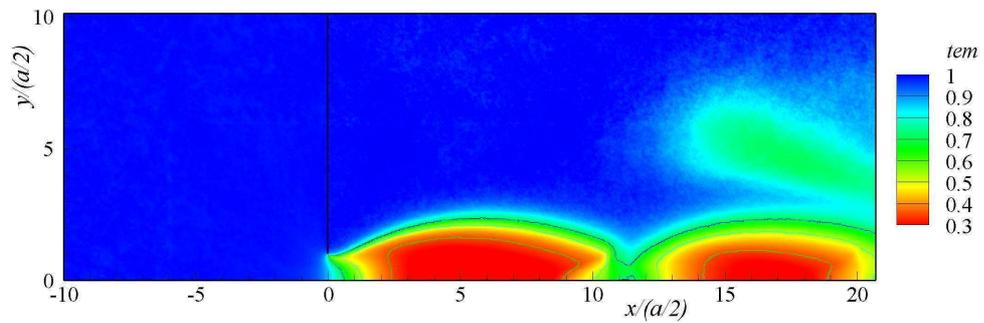
D.3 Campos de Temperatura



(a)

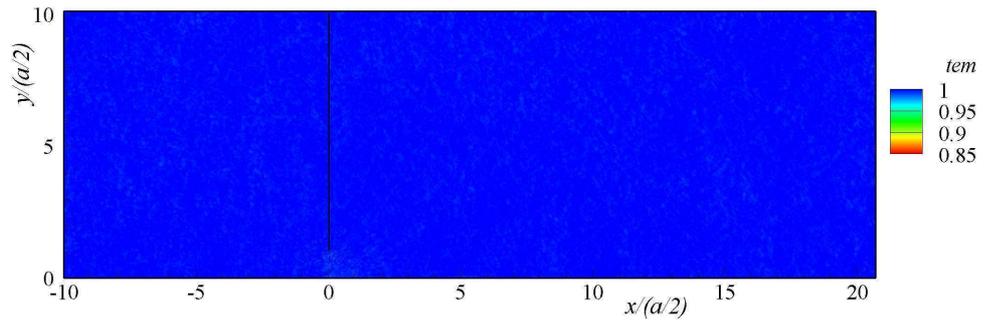


(b)

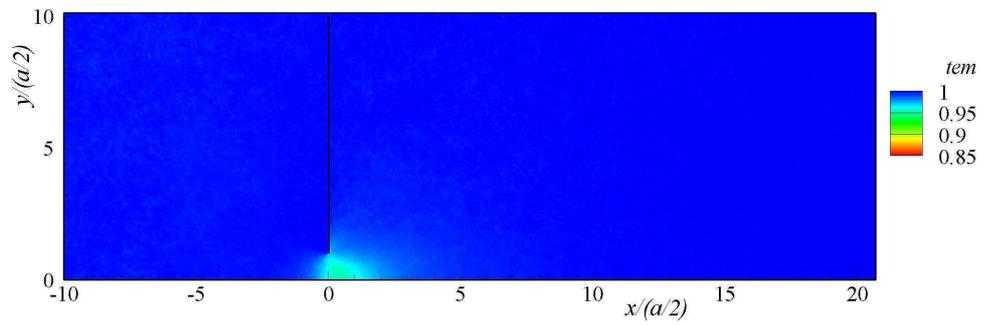


(c)

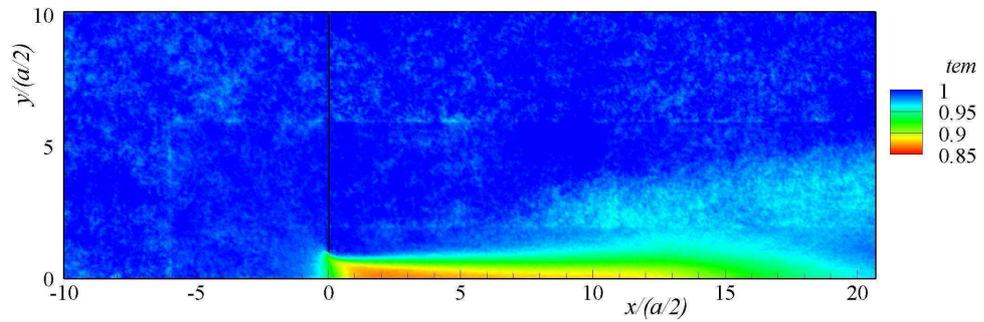
Figura 79: Campo de temperatura ($tem=T/T_0$) para $p_1/p_0 = 0.1$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).



(a)



(b)



(c)

Figura 80: Campo de temperatura ($tem=T/T_0$) para $p_1/p_0 = 0.7$ e (a) $\delta = 0.01$ (moléculas livres), (b) $\delta = 10$ (transição) e (c) $\delta = 1000$ (hidrodinâmico).

APÊNDICE E – Análise da Influência dos Parâmetros de Simulação no Cálculo do Escoamento ao redor do Satélite

E.1 Principais Parâmetros

Os parâmetros geométricos que definem o tamanho e a discretização da grade de células utilizada na simulação do escoamento ao redor do satélite estão definidos na Figura 81. A Tabela 21 apresenta a descrição dos parâmetros cuja influência é analisada neste apêndice.

Além desses parâmetros específicos é analisada a influência dos parâmetros que definem o modelo de colisão entre as partículas, expressa basicamente pelos parâmetros γ , ω e X_{inel} .

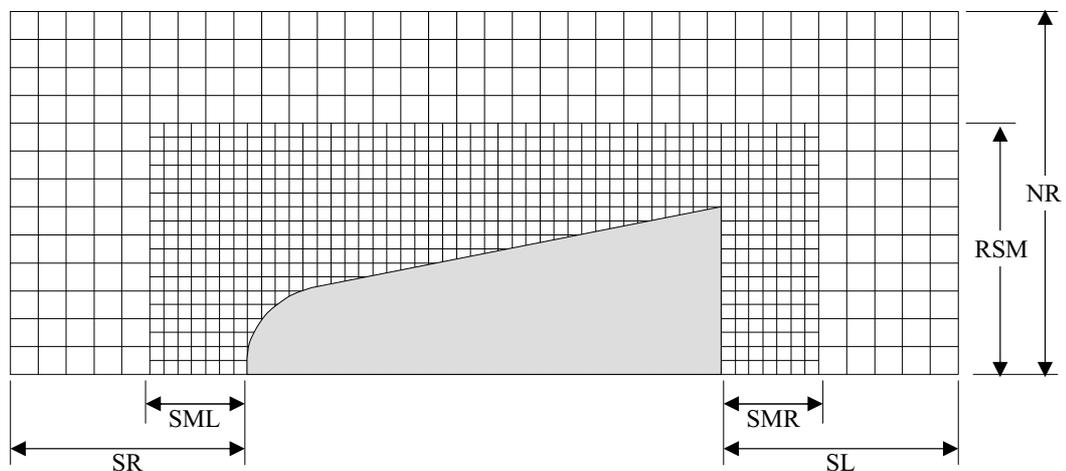


Figura 81: Parâmetros geométricos que definem a grade de células.

Tabela 21: Descrição dos parâmetros da simulação numérica do escoamento ao redor do satélite.

Parâmetro	Descrição
DT	Intervalo de tempo adimensional utilizado na simulação, Δt
INM	Número inicial de partículas modelo.
SL	Extensão do campo de escoamento na direção x à montante do satélite.
SR	Extensão do campo de escoamento na direção x à jusante do satélite.
NR	Raio do campo de escoamento (“direção r ”).
SML	Extensão do campo de escoamento na direção x à montante do satélite, células menores.
SMR	Extensão do campo de escoamento na direção x à jusante do satélite, células menores.
RSM	Raio do campo de escoamento, células menores (“direção r ”).
NCYB	Número de células ao longo do diâmetro.

E.2 Influência dos Diversos Parâmetros

Para analisar a influência dos parâmetros listados na Tabela 21 no resultado da simulação foi fixada uma configuração com valores de referência para estes parâmetros. Essa configuração é definida na Tabela 22. Simulações foram feitas alterando os valores de cada parâmetro, ou grupo de parâmetros relacionados, e a influência foi avaliada através da variação dos valores do coeficiente de arrasto, C_D , e dos coeficientes de pressão, C_p , de atrito, C_f , e de transferência de energia, C_h , em pontos específicos na ponta da ogiva. A análise foi realizada considerando sempre $Ma=10$ e “satélite frio”, ou seja, $T_s/T_\infty = 1$, e o gás diatômico, N_2 . Espera-se comportamento numérico semelhante para as outras combinações de número de Mach e temperatura do satélite.

Tabela 22: Valores dos parâmetros da configuração de referência.

DT	INM/ 10^6	SL	SR	NR	SML	SMR	RSM	NCYB
0.002	2	0.5	1.5	3	0.25	1.25	1.5	12

Nas Tabelas 23 e 24 é mostrada a influência do incremento de tempo de simulação e do número inicial de partículas modelo nos dois regimes extremos: de moléculas livres e hidrodinâmico. Para os mesmos regimes, nas Tabelas 25 e 26 a influência do volume definido para o campo de escoamento é mostrado. Nas quatro tabelas é possível notar uma variação pequena nos coeficientes, todas menores do que 2%, indicando a adequabilidade dos valores adotados para os parâmetros de referência de simulação.

Particularmente, na Tabela 26 foi dobrado o número inicial de partículas modelo para o volume maior com intuito de verificar se a alteração da densidade numérica devido ao aumento do volume (conforme definido pelos valores dos parâmetros da Tabela 22) poderia

estar influenciando também os resultados da simulação, mas a variação dos valores dos coeficientes se mantiveram pequenas.

Tabela 23: Influência dos parâmetros DT e INM, regime de moléculas livres (Re=0.1).

DT	INM/10 ⁶	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
0.002	2	2.082	2.189	0.996	0.983				
0.001	2	2.081	2.188	0.993	0.982	0.1%	0.0%	-0.3%	-0.1%
0.002	2	2.082	2.189	0.996	0.983				
0.002	1	2.081	2.184	0.991	0.983	0.1%	-0.2%	-0.4%	-0.1%

Tabela 24: Influência dos parâmetros DT e INM, regime hidrodinâmico (Re=10000).

DT	INM/10 ⁶	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
0.002	2	0.526	1.839	0.320	0.421				
0.001	2	0.525	1.828	0.324	0.415	-0.3%	-0.6%	1.3%	-1.4%
0.002	2	0.526	1.839	0.320	0.421				
0.002	1	0.527	1.840	0.320	0.421	0.1%	0.1%	0.0%	0.1%

Tabela 25: Influência do volume do campo de escoamento, regime de moléculas livres (Re=0.1).

SL	SR	NR	SML	SMR	RSM	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
0.5	1.5	3	0.25	1.25	1.5	2.082	2.189	0.996	0.983				
1	3	6	0.5	2.5	3	2.080	2.191	0.992	0.982	0.0%	0.2%	-0.3%	-0.2%

O último parâmetro da Tabela 21 analisado é NCYB, conforme mostrado na Tabela 27. Este parâmetro define o grau de discretização das células maiores, e o que se pode deduzir desta tabela é que o valor adotado nas simulações, NCYB=12, restringe a variação dos diversos coeficientes no regime hidrodinâmico a um valor inferior a 0.5%, aumentado este limite para cerca de 5% no regime de transição. À medida que o escoamento se torna mais denso, ou hidrodinâmico, o padrão de escoamento se torna mais complexo, com surgimento de sistemas de choque-expansão, o que exige com certeza uma maior discretização da grade de células para capturar de forma mais adequada o comportamento do escoamento. Isto explica a maior variação dos coeficientes no regime hidrodinâmico para a variação mostrada de NCYB nesta tabela, indicando que, com NCYB \approx 50, não deve haver mais variação significativa dos coeficientes.

O que se observa, de forma geral, é que à medida que o escoamento se torna hidrodinâmico, menores valores de NCYB tendem a levar a resultados superestimados para

Tabela 26: Influência do volume do campo de escoamento, regime hidrodinâmico (Re=10000).

INM/10 ⁶	SL	SR	NR	SML	SMR	RSM	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
2	0.5	1.5	3	0.25	1.25	1.5	0.526	1.839	0.320	0.421	-0.5%	0.0%	0.1%	0.1%
2	1	3	6	0.5	2.5	3	0.524	1.840	0.320	0.421				
2	1	3	6	0.5	2.5	3	0.524	1.840	0.320	0.421	0.2%	1.9%	-0.5%	0.3%
4	1	3	6	0.5	2.5	3	0.525	1.875	0.319	0.423				

o coeficiente de arrasto, e subestimados para os outros coeficientes. Deve ser observado também que os resultados apresentados no Capítulo 4 foram obtidos para NCYB=10, com resultados um pouco diferentes do que os obtidos neste apêndice para NCYB=12.

Entretanto, para o nível de discretização necessário para simulação adequada no regime hidrodinâmico, o esforço computacional se torna bem maior para se chegar a um resultado, o que tornou proibitivas mais simulações dentro do período disponível para confecção deste trabalho. De qualquer forma, para este regime, existem disponíveis as ferramentas da dinâmica dos gases e mecânica dos fluidos contínuos, que podem eventualmente oferecer uma solução alternativa menos custosa.

Tabela 27: Influência do parâmetro NCYB (Ma = 10, gás diatômico, satélite “frio”).

Regime	Re	NCYB	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
moléculas livres	0.1	12	2.082	2.189	0.996	0.983				
		24	2.081	2.194	0.993	0.981	0.0%	0.2%	-0.3%	-0.2%
Transição	100	12	1.019	1.928	0.520	0.659	-	-	-	-
		18	1.010	1.871	0.496	0.632	-0.9%	-2.9%	-4.6%	-4.0%
		24	1.016	1.955	0.505	0.653	-0.4%	0.9%	-2.9%	-0.9%
		18	0.538	1.796	0.258	0.389	-	-	-	-
Hidrodinâmico	1000	24	0.536	1.877	0.243	0.379	-0.2%	4.5%	-5.8%	-2.6%
		36	0.529	1.827	0.217	0.341	-1.5%	1.7%	-16.0%	-12.4%

E.3 Influência do Modelo de Colisão

Outra análise realizada foi relativa à influência do modelo de colisão adotado (HS para monoatômico, e VHS para diatômico), definidos pela razão de calores específicos, γ , pelo expoente de viscosidade, ω , e pela parcela de colisão que são inelásticas, X_{inel} , com o intuito de verificar a contribuição do modelo no resultado dos cálculos. Pelo que se observa na Tabela 28, o fato das colisões poderem ser inelásticas é que introduz as diferenças observadas entre o uso dos modelos monoatômico e diatômico de colisão.

Tabela 28: Influência dos parâmetros γ e ω - gás monoatômico: $\gamma = 1.67$ e $\omega = 0.5$; gás diatômico: $\gamma = 1.4$ e $\omega = 0.75$ (N_2)

Regime	γ	ω	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
moléculas livres	1.4	0.74	2.082	2.189	0.996	0.983				
	1.67	0.5	2.079	2.170	0.988	0.976	-0.1%	-0.9%	-0.7%	-0.4%
Hidrodinâmico	1.4	0.74	0.526	1.839	0.320	0.421				
	1.67	0.5	0.527	1.845	0.325	0.431	0.1%	0.3%	1.6%	2.4%

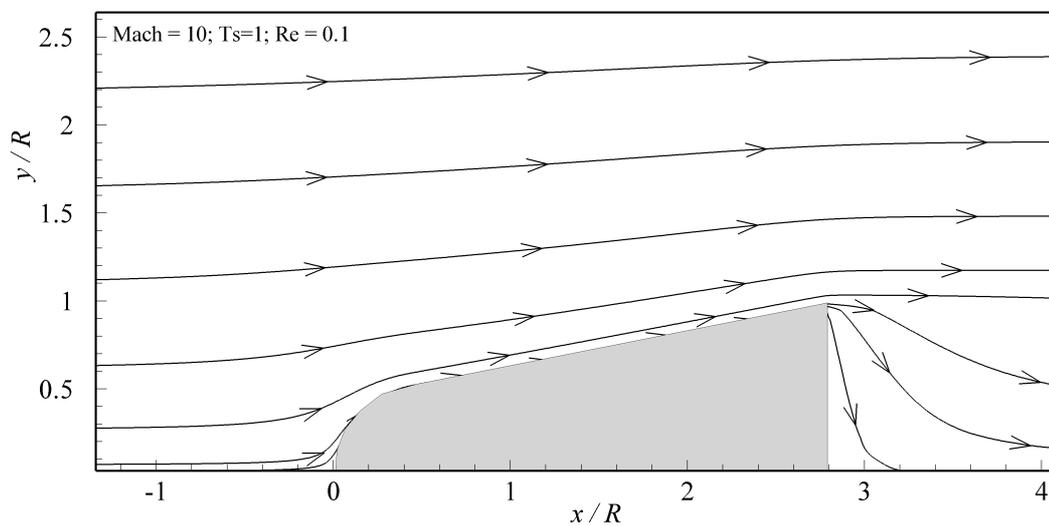
Tabela 29: Influência do tipo de colisões - apenas elásticas: $X_{inel} = 0.0$; parte inelásticas: $X_{inel} = 0.2$.

Regime	X_{inel}	C_D	C_p	C_f	C_h	ΔC_D	ΔC_p	ΔC_f	ΔC_h
moléculas livres	0.0	2.082	2.189	0.996	0.983				
	0.2	2.082	2.188	0.992	0.982	0.0%	0.0%	-0.4%	-0.1%
Hidrodinâmico	0.0	0.526	1.839	0.320	0.421				
	0.2	0.515	1.760	0.277	0.326	-2.3%	-4.3%	-13.5%	-22.6%

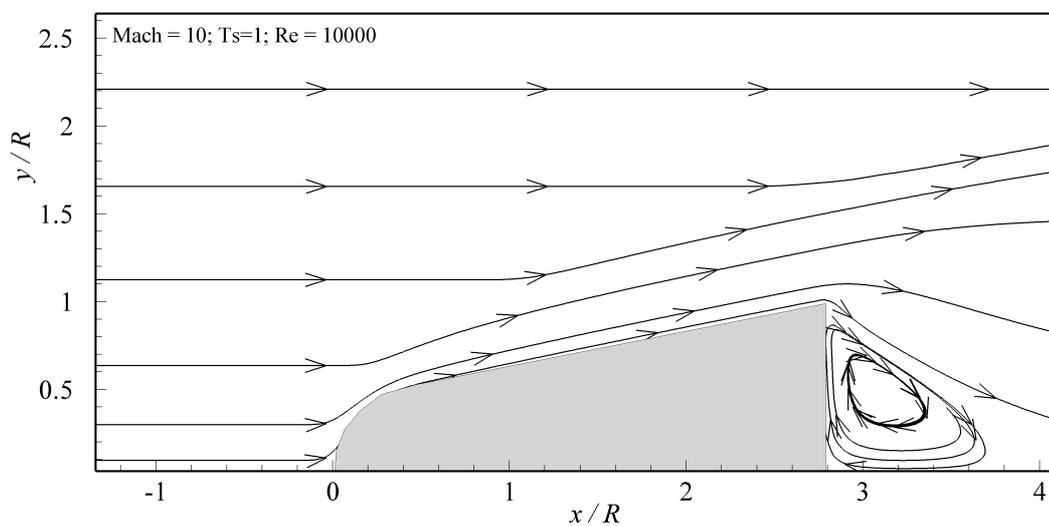
*APÊNDICE F - Escoamento ao Redor do
Satélite*

F.1 Resultados para Satélite “Frio”

F.1.1 Linhas de Corrente



(a)



(b)

Figura 82: Linhas de corrente para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.1.2 Campo de Densidade

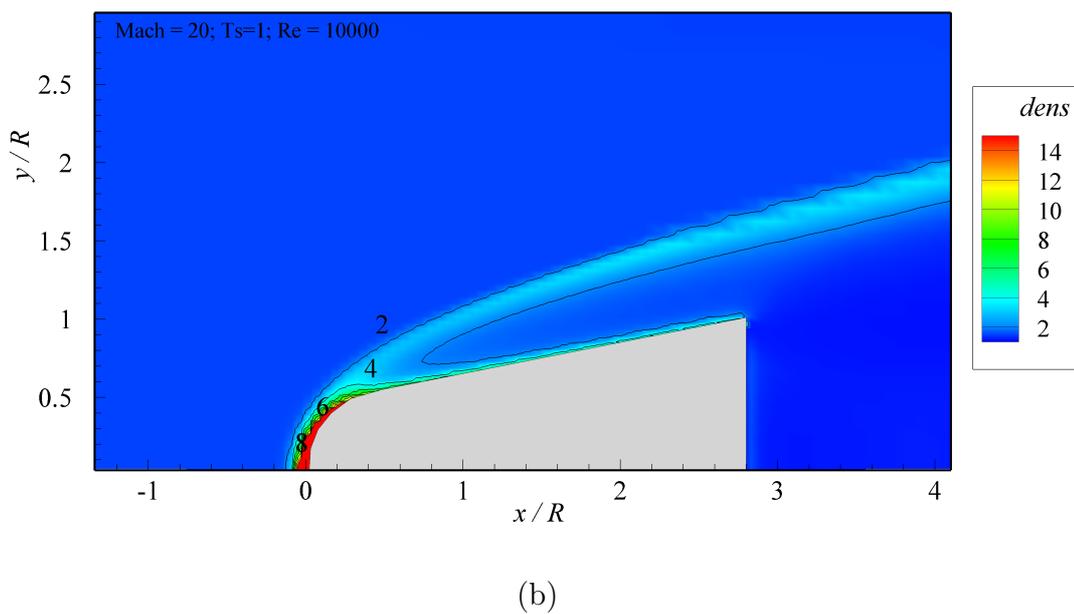
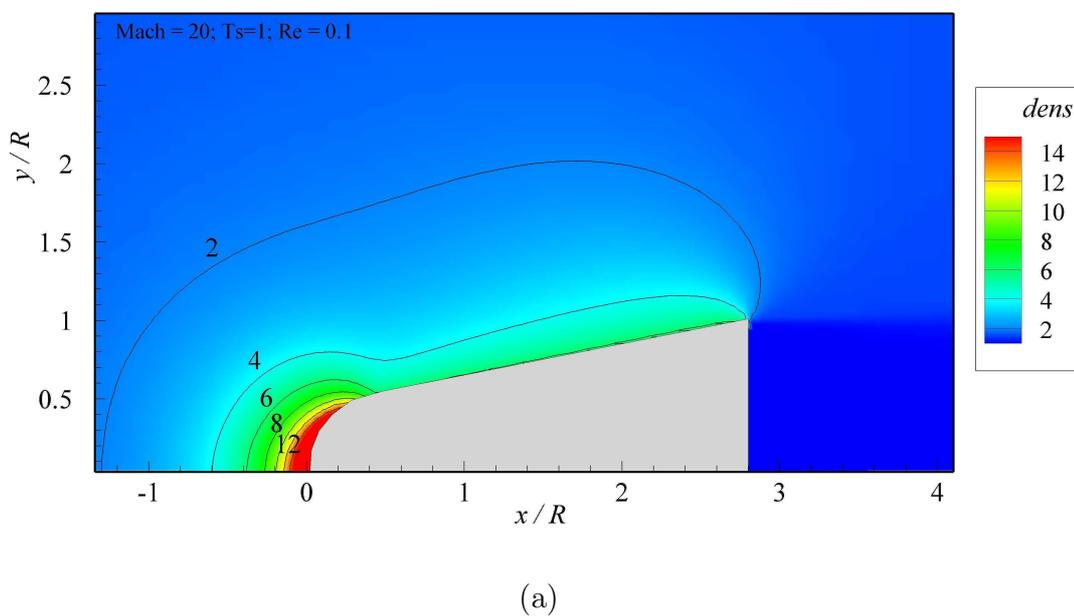
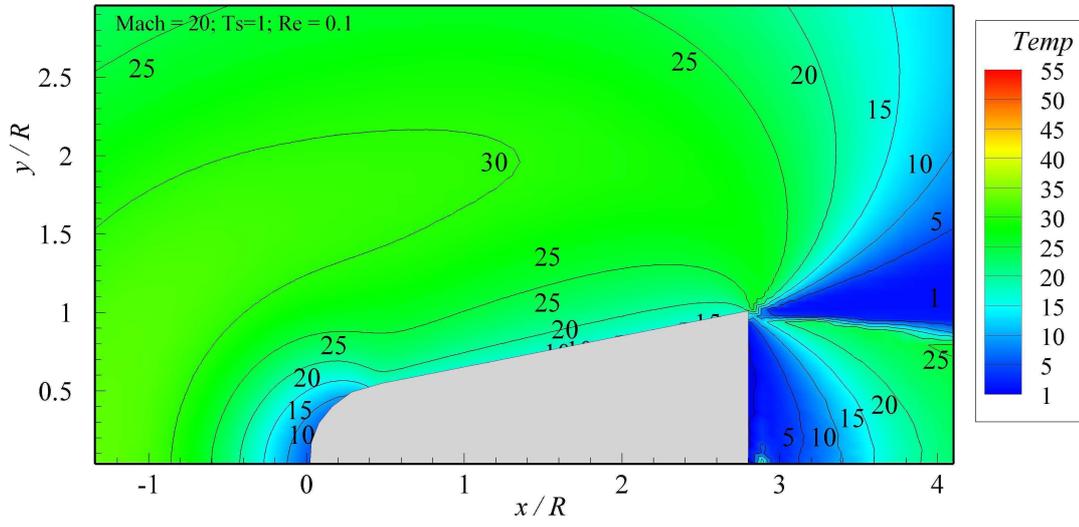
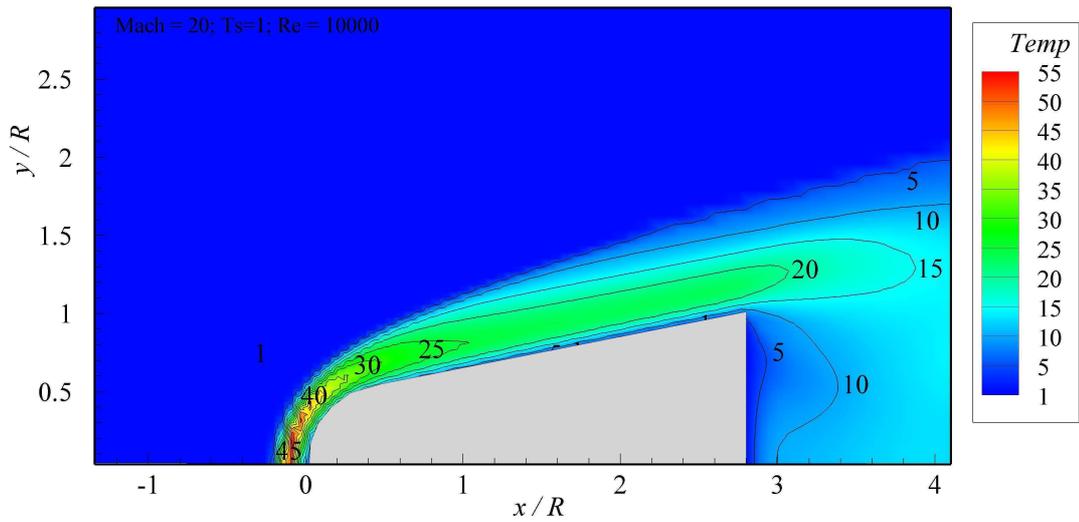


Figura 83: Campo de densidade ($dens = \rho/\rho_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.1.3 Campo de Temperatura



(a)



(b)

Figura 84: Campo de temperatura ($Temp = T/T_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.1.4 Número de Mach Local

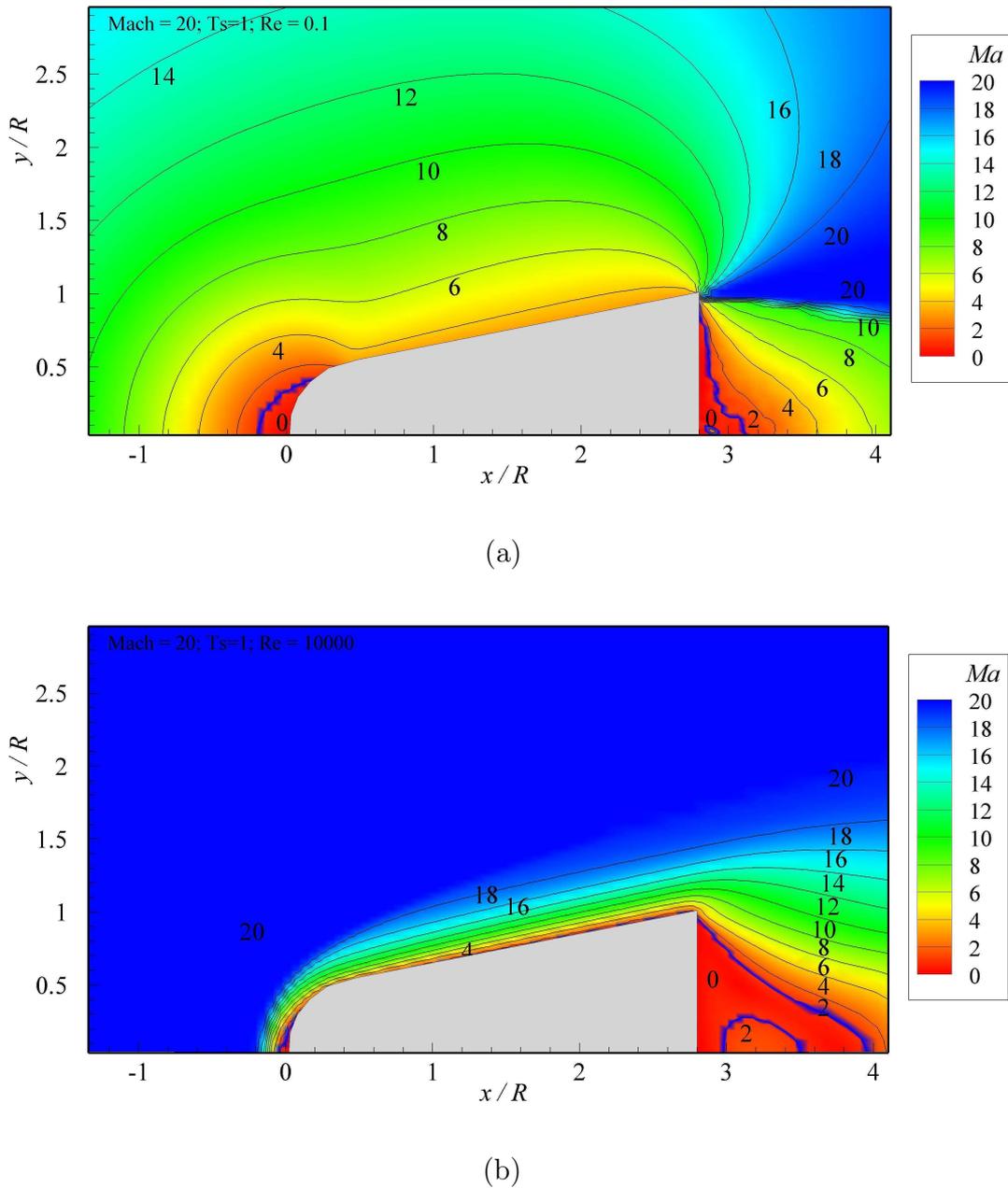
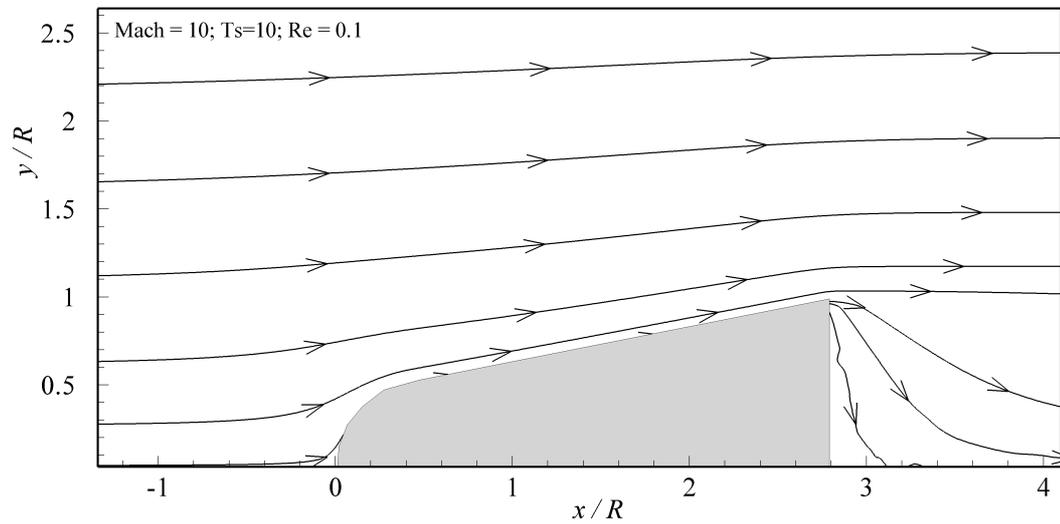


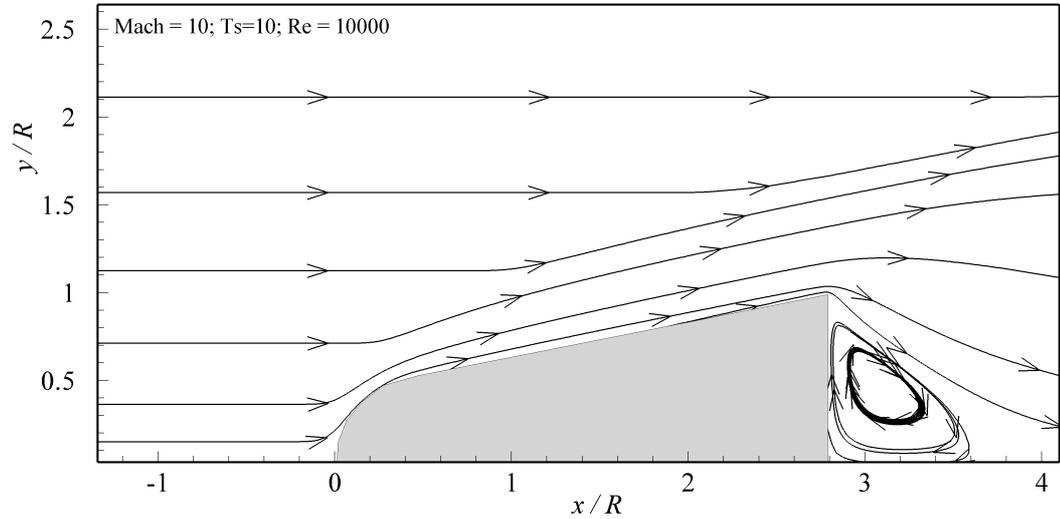
Figura 85: Número de Mach local para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 1$ e (a) $Re = 0.1$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.2 Resultados para Satélite “Aquecido”

F.2.1 Linhas de Corrente



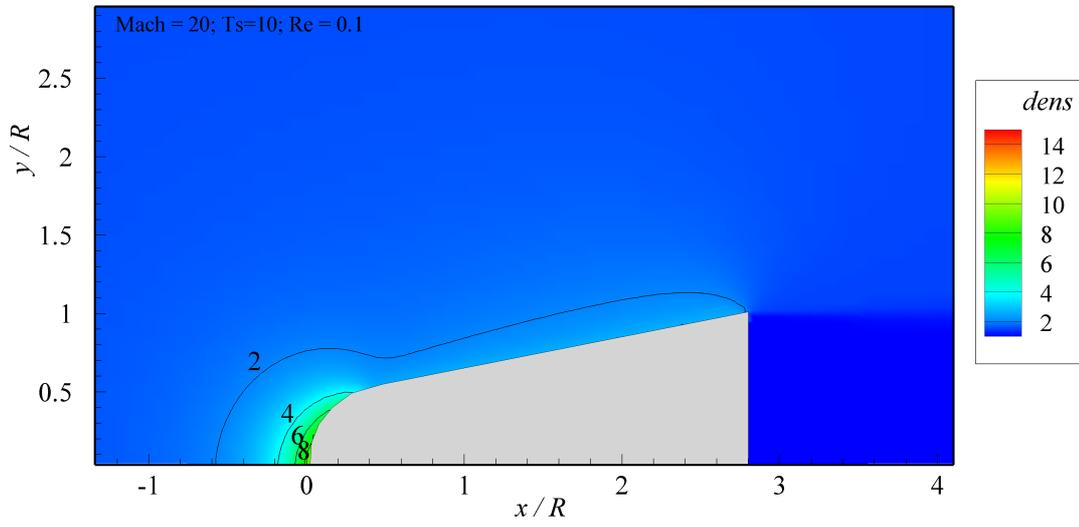
(a)



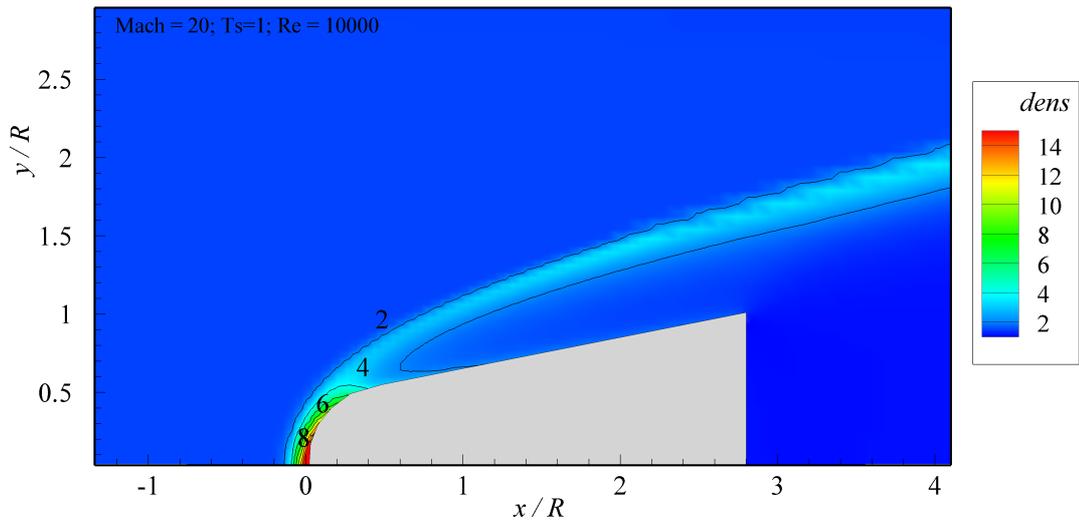
(b)

Figura 86: Linhas de corrente para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.2.2 Campo de Densidade



(a)



(b)

Figura 87: Campo de densidade ($dens = \rho/\rho_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.2.3 Campo de Temperatura

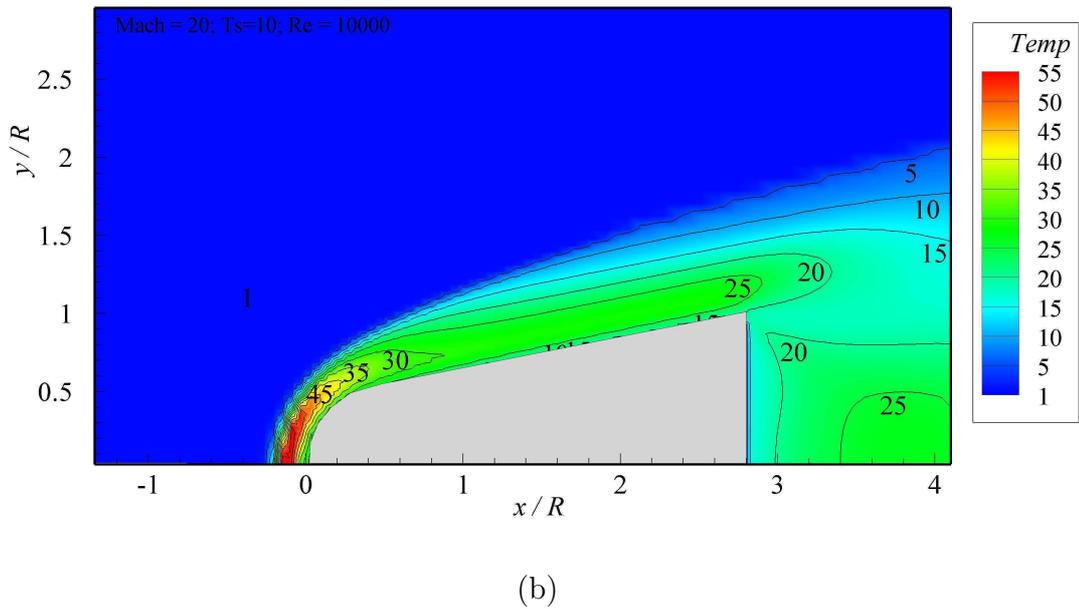
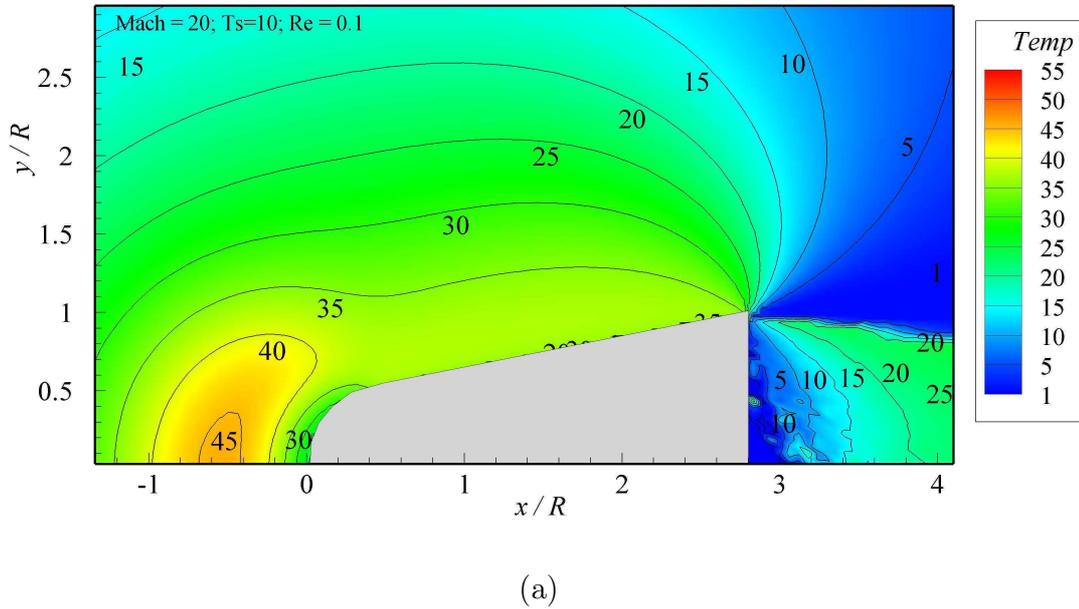


Figura 88: Campo de temperatura ($Temp = T/T_\infty$) para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 10$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).

F.2.4 Número de Mach Local

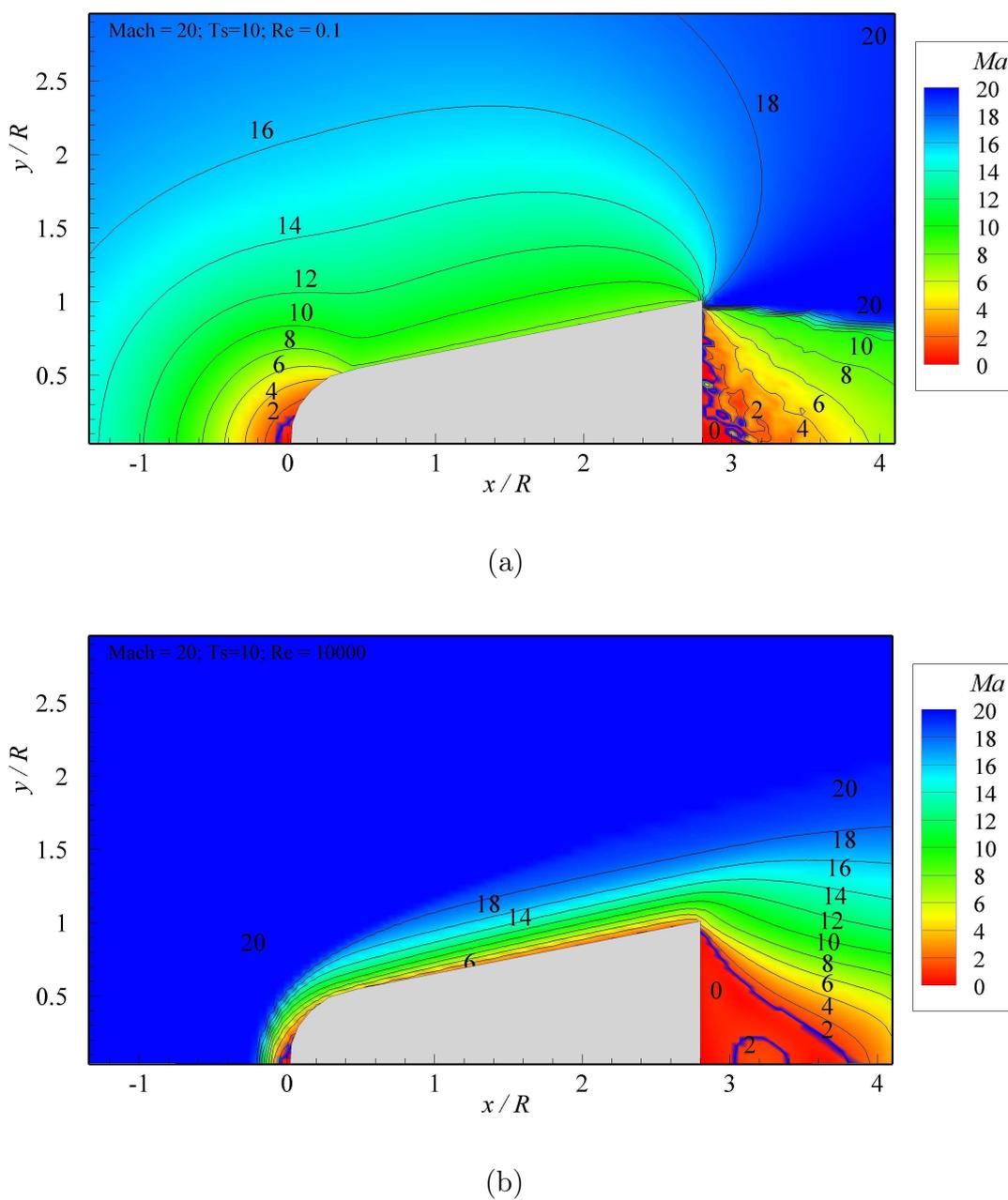


Figura 89: Número de Mach local para $M_\infty = 20$, $T_s/T_\infty = 20$, (a) $Re = 0.1$ (moléculas livres) e (b) $Re = 10000$ (hidrodinâmico).