



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
**INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS**

## **ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO COEFICIENTE DE ACOMODAÇÃO NO ESCOAMENTO EM MICROCANAIS**

RELATÓRIO FINAL DE PROJETO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
(PIBIC/CNPq/INPE)

Israel Borges Sebastião (UMC, Bolsista PIBIC/CNPq)  
E-mail: [borgesebastiao@hotmail.com](mailto:borgesebastiao@hotmail.com)

Dr. Jeronimo dos Santos Travelho (LAC/CTE/INPE, Orientador)  
E-mail: [jeff@lac.inpe.br](mailto:jeff@lac.inpe.br)

### **COLABORADORES**

Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos (LCP/CTE/INPE)

Julho de 2008



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
**INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS**

**ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO COEFICIENTE DE  
ACOMODAÇÃO NO ESCOAMENTO EM MICROCANAIS**

Israel Borges Sebastião

Relatório Final do Projeto de Iniciação Científica orientada pelo Dr.  
Jeronimo dos Santos Travelho

INPE  
São José dos Campos, SP  
2008

*“São fúteis e cheias de erros as ciências que não nasceram da experimentação, mãe de todo conhecimento”.*

*(Leonardo da Vinci).*

*Aos meus pais, mestres e amigos...*

## **AGRADECIMENTOS**

O autor gostaria de agradecer ao Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos (LCP/CTE/INPE) pelas produtivas discussões desenvolvidas durante o presente trabalho, que foi parcialmente suportado pelo Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica do INPE e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (PIBIC/CNPq/INPE).

## RESUMO

O método de simulação direta de Monte Carlo (DSMC) é utilizado para simular um escoamento bidimensional de um gás diatômico, a uma temperatura ambiente, através de um microcanal composto por duas placas paralelas com diferentes coeficientes de acomodação que são especificados através do modelo de Cergignani-Lampis-Lord (CLL). O objetivo deste trabalho é observar a formação de perturbações devido à diferença dos coeficientes de acomodação entre a superfície inferior e superior do microcanal para diferentes números de Knudsen e Reynolds baseados nas condições do feixe livre. O escoamento foi ainda simulado para 3 diferentes direções do feixe livre, uma paralela e as outras defasadas a  $45^\circ$  e  $-45^\circ$  em relação às superfícies do microcanal. A fim de auxiliar nesta avaliação são plotados campos de correlação entre as flutuações de velocidade na direção  $x$ , o que possibilita medir a magnitude da turbulência envolvida no escoamento. Os resultados das propriedades macroscópicas também são plotados e mostram nitidamente uma assimetria em todo o escoamento, além de diferentes magnitudes dos gradientes para os dois números de Knudsen envolvidos. Toda computação foi executada com máquinas convencionais.

**Palavras-chave:** DSMC, microcanal, coeficiente de acomodação, escoamento rarefeito.

## ABSTRACT

The direct simulation Monte Carlo (DSMC) method is used to simulate a two-dimensional flow of a diatomic gas at an ambient temperature through a microchannel composed of two parallel plates with different accommodation coefficients that are specified by the Cercignani-Lampis-Lord (CLL) model. The aim of this work is to observe the disturbance developments due to the difference between the accommodation coefficients between the lower and upper surface of the microchannel, are used different Knudsen and Reynolds' numbers based on the freestream conditions. The flow was also simulated to 3 different freestream directions, a parallel and the others inclined to  $45^\circ$  and  $-45^\circ$  about the microchannel surfaces. In order to assist this evaluation are plotted correlation fields between the velocity fluctuations in  $x$  direction, which allows measuring the turbulence magnitude involved in the flow. The macroscopic properties results are also plotted and show clearly an asymmetry at flow fields, in addition to different gradient scales for the two Knudsen numbers involved. All computing was performed with conventional machines.

**Keywords:** DSMC, microchannel, accommodation coefficient, rarefied flow.

## SUMÁRIO

<b>1 - INTRODUÇÃO.....</b>	<b>09</b>
<b>2 - ATIVIDADES REALIZADAS.....</b>	<b>12</b>
<b>3 - FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....</b>	<b>15</b>
3.1 O MÉTODO DSMC.....	15
<b>4 - METODOLOGIA.....</b>	<b>19</b>
4.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO UTILIZADAS.....	19
4.2 FLUTUAÇÕES MACROSCÓPICAS.....	22
<b>5 - RESULTADOS E ANÁLISES.....</b>	<b>25</b>
<b>6 - CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....</b>	<b>46</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>47</b>

# 1 INTRODUÇÃO

Atualmente cada vez mais tem surgido o interesse na área da micromecânica e microeletrônica. O crescente desenvolvimento tecnológico tem permitido a construção e operação destes micro-elementos mecânicos (MEMS). No entanto, um dos problemas no projeto desses elementos se refere ao escoamento de gases, uma vez que suas dimensões podem ser comparáveis ao livre caminho médio das moléculas do gás, o escoamento pode ser classificado como rarefeito, invalidando a hipótese do contínuo, bem como o princípio da aderência, neste caso é necessário uma abordagem do ponto de vista molecular do escoamento. Portanto, o entendimento dos fenômenos físicos presentes torna-se um ponto fundamental no aperfeiçoamento e domínio desta tecnologia.

Neste trabalho o método de simulação direta de Monte Carlo (DSMC) foi utilizado para simular um escoamento bidimensional de um gás diatômico, a uma temperatura ambiente, através de um microcanal composto por duas placas planas paralelas a temperaturas constantes e iguais, porém para cada uma das superfícies são atribuídos diferentes coeficientes de acomodação ( $\sigma$ ). Este coeficiente indica em que extensão as propriedades das moléculas, tais como energia ( $E$ ) e temperatura, são alteradas após a colisão com uma superfície. Os valores deste parâmetro são dependentes do tipo e rugosidade da superfície, e são tratados como dados obtidos experimentalmente. O modelo de Cercignani-Lampis-Lord (CLL) é aplicado para a especificação destes coeficientes, onde uma das placas é considerada como difusa (acomodação completa), o que representa valores mais realistas, e a outra pode assumir valores entre 1 e 0. Para o valor deste coeficiente nulo, a superfície é dita como especular (acomodação nula), e significa dizer que, a interação da molécula com a superfície, não altera em nada as propriedades da partícula.

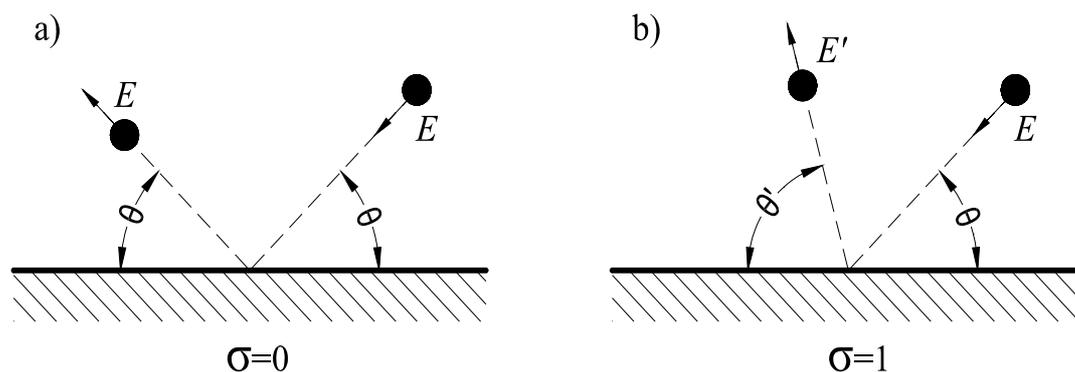


Fig. 1. a) Reflexão especular b) Reflexão difusa

A formação de perturbações no escoamento, tais como vórtices, devido à diferença entre as tensões de cisalhamento causada pelos diferentes coeficientes de acomodação de energia translacional e rotacional atribuídos às superfícies, é o principal objeto de estudo deste trabalho, uma vez que estas perturbações são relacionadas a perdas de energia, muitas vezes importantes na estrutura do escoamento.

São apresentados dois microcanais, onde um possui altura de 50  $\mu\text{m}$  e o outro de 200  $\mu\text{m}$ , para ambos os casos seu comprimento é de aproximadamente 10 vezes sua altura. Uma análise qualitativa do escoamento é feita para diferentes números de Knudsen - adimensional que avalia o grau de rarefação do fluido - e ainda diferentes números de Reynolds - razão entre as forças inerciais e viscosas de uma porção de fluido. O número de Knudsen é conceitualmente definido como a razão entre o livre caminho médio da molécula do gás e o menor comprimento característico da geometria estudada, que no caso deste trabalho é a altura do microcanal.

O algoritmo utilizado neste trabalho é uma modificação das condições de contorno do código escrito por Bird (1994). Toda a computação foi executada em máquinas convencionais, e o tempo consumido para a obtenção do regime permanente em cada caso foi de aproximadamente 50 horas, salvo os casos

cujo número de Reynolds foi inferior a um, onde o tempo foi cerca de 600 horas. Os resultados apresentados nas seções procedentes foram plotados com o auxílio de um software comercial (Tecplot 10).

## 2 ATIVIDADES REALIZADAS

Este capítulo do relatório apresenta um resumo das atividades realizadas durante o PIBIC/INPE 2007/2008, com o projeto “*Estudo da influência do coeficiente de acomodação no escoamento em microcanais*”, e visa dar ao leitor uma idéia das principais etapas envolvidas no trabalho.

O mês de Agosto foi dedicado ao estudo de conceitos de mecânica analítica, como a formulação Lagrangeana e suas aplicações, em especial no problema dos dois corpos que é um assunto chave para o estudo do choque de partículas.

Em Setembro iniciou-se o projeto propriamente dito, com o estudo do choque de partículas, pois na análise molecular dos gases, é de se esperar que ocorram colisões entre as moléculas, daí a importância do estudo desta situação. Foram estudadas formulações a partir da integração das equações do movimento com princípios de conservação e mecânica analítica, a qual permitem obter um cálculo completo para uma colisão binária, determinando seu o ângulo de espalhamento. Para reforçar estes conceitos foram simuladas em *Excel* colisões binárias utilizando o modelo de esferas rígidas e o modelo com campo do tipo Lennard Jones.

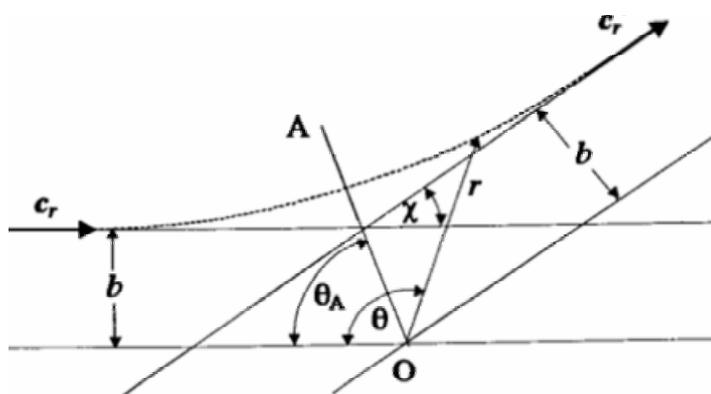


Fig. 2. Representação típica de uma colisão binária.

No mês de Outubro o projeto seguiu com o estudo da teoria cinética dos gases elementar, o qual visava conhecer mais profundamente termos e conceitos comuns em análises moleculares como, por exemplo, o livre caminho médio, frequência de colisão, coeficiente de acomodação, etc., além de compreender a relação que estes termos possuem com propriedades macroscópicas como temperatura, viscosidade, difusividade, condutividade térmica, etc.

Nos dois meses seguintes foi iniciada a leitura do livro "*Molecular Gas Dynamics and The Direct Simulation of Gas Flows*" do autor G.A. Bird, que é uma das principais referências no assunto. Em paralelo o aluno foi apresentado à linguagem de programação Fortran, para se familiarizar com sua estrutura e funções, na qual estão escritos os programas DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) desenvolvidos por Bird, aonde um destes virá a ter suas condições de contorno modificadas a fim de atender as análises deste projeto. Ainda no mesmo período o método de Monte Carlo foi superficialmente estudado, bem como a geração de números aleatórios que são freqüentemente empregados no DSMC.

O aluno finalizou o ano de 2007 escrevendo em Fortran 77 um programa simplificado que aplica conceitos básicos do DSMC, com o intuito de reforçar alguns dos tópicos vistos anteriormente.

Em Janeiro de 2008 foi concluída a interpretação detalhada de um dos códigos elementares escritos por Bird que utilizam o DSMC, isto forneceu uma visão geral do método e das rotinas básicas que são aplicadas a outros de seus programas, além de finalizar a leitura da bibliografia citada acima.

Em Fevereiro e Março foi interpretado um programa existente (BIRD, 1994) mais complexo, que é justamente aquele que seria modificado como já comentado. Uma vez que o código foi interpretado, foram feitos alguns estudos

de caso com resultados de modelagens disponíveis na literatura, para verificar se o programa estava sendo utilizado corretamente.

Nos meses restantes, foram realizadas as modificações previstas no programa, modelando escoamentos sem analisar-se a transferência de calor e em seguida modelos que avaliavam a transferência. O passo final foi organizar os resultados obtidos, que são apresentados nos capítulos seguintes e escrever o relatório.

## 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo visa abordar a teoria principal envolvida no trabalho de forma mais detalhada, além de comentar o atual estado da arte.

### 3.1 O MÉTODO DSMC

A dinâmica molecular dos gases tem sido de grande importância para a humanidade nos últimos séculos. Um dos primeiros e principais estudos feitos nesta área foi a formulação da equação de Boltzmann em 1872, que apesar de baseada nas leis físicas mais elementares, é cercada de hipóteses e se torna praticamente impossível de ser resolvida analiticamente para a grande maioria dos casos reais. Mesmo suas simplificações não fornecem o realismo necessário em uma análise de engenharia, como por exemplo, o estudo de gases poliatômicos que sofrem reações durante o escoamento ou até mesmo o estudo de plasma.

Outra equação muito utilizada que descreve a dinâmica de um fluido é a de Navier-Stokes, que é uma simplificação das equações de equilíbrio de momentum, porém esta fica limitada à hipótese do contínuo e não é válida para situações onde o grau de rarefação de um gás, que é medido através do número de Knudsen, excede o valor de 0.1.

Visando atender um range mais extenso de situações, em especial aquelas que envolvem gases a baixas densidades e pequenos comprimentos característicos, isto é, números de Knudsen superiores a 0.1, o método de simulação direta de Monte Carlo (DSMC) desenvolvido por Bird (1994), é atualmente aplicado nos mais diversos segmentos, porém com um enfoque

maior na área aeroespacial e de micro-geometrias (LIOU e FANG, 2001). O método consiste em uma abordagem molecular e discreta do gás, onde é definido um número relativamente pequeno de moléculas a serem simuladas no algoritmo. Assim as moléculas reais do gás são representadas por um grupo relativamente pequeno de moléculas simuladas. Estas moléculas simuladas são distribuídas em um espaço físico dividido em células e sub células, suas posições e velocidades iniciais são gerados aleatoriamente, mas ainda de forma que haja consistência com as condições reais do gás. É ainda definido um intervalo de tempo chamado (*step*), sob o qual as informações de cada célula, tais como energia, número de moléculas, número de colisões, velocidade e posições das mesmas são atualizados. Assim, a partir destas informações, cada vez que um número definido de atualizações é atingido, esses dados são amostrados a fim de se obter uma média de seus valores, isto é, calcular as propriedades macroscópicas do gás, tais como pressão, temperatura, viscosidade entre outras, baseado na média dos valores microscópicos obtidos.

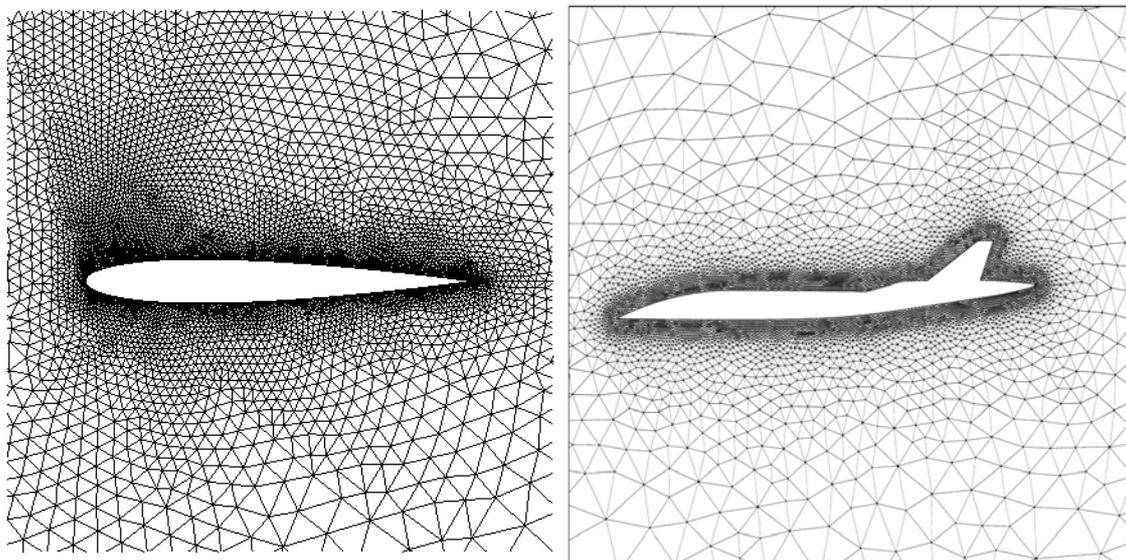


Fig. 3. Exemplo de malhas geradas por softwares específicos.

O DSMC tem sido baseado diretamente na física da teoria cinética dos gases, por isso o método compartilha dos mesmos fundamentos da equação de

Boltzmann, como por exemplo, a consideração do caos molecular, entretanto a justificativa em aplicá-lo está relacionado à dificuldade matemática e as hipóteses não tão realistas da equação de Boltzmann. Uma das principais diferenças entre o DSMC e a equação é que o método não depende da existência de colisões inversas. Além disso, diferente dos convencionais métodos CFD (*Computational Flow Dynamics*), os quais buscam resolver as equações matemáticas que modelam o sistema por uma aproximação gradual até valor ideal, conhecida como convergência, e que possuem critérios para suas aplicações, o DSMC não depende de um modelo matemático e sim apenas da física relacionada ao escoamento, desta forma as flutuações presentes nos valores obtidos pelo DSMC são devidas exclusivamente ao espalhamento estatístico nas amostragens e é totalmente diferente da convergência dos métodos CFD.

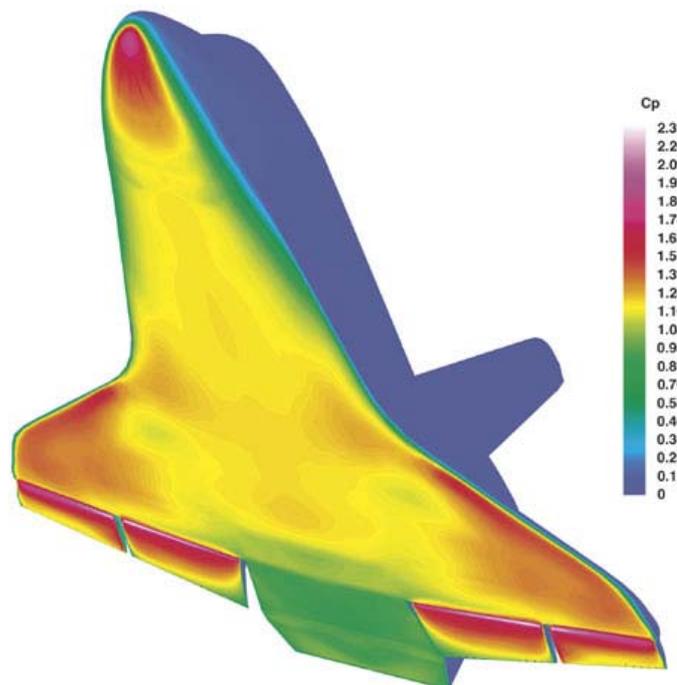


Fig. 4. Distribuição do calor específico numa aeronave através de um software CFD.

Para que os resultados do DSMC sejam consistentes existem algumas condições que devem ser respeitadas, como por exemplo, o fato de que o intervalo de tempo selecionado deve ser muito menor que o tempo médio entre

colisões de uma mesma molécula, e as dimensões características da célula sejam relativamente maiores que o espaço deslocado pela molécula a cada intervalo de tempo, isto visa garantir que a partícula simulada permaneça na mesma célula durante alguns intervalos de tempo e assim colida com outras moléculas. Além disso, a distância média entre colisões e a dimensão da subcélula devem ser muito pequenas se comparadas ao livre caminho médio da molécula, esta condição visa garantir uma representação precisa dos campos de velocidade, pressão e temperatura, principalmente na existência de gradientes elevados. Finalmente resultados empíricos, têm mostrado que o número de moléculas simuladas por célula deve ser de pelo menos 20.

A validação dos resultados obtidos através do método DSMC é baseada no fato de que as hipóteses acima são respeitadas, em comparações com resultados obtidos experimentalmente ou ainda em alguns casos através de modelos analíticos, como por exemplo, a equação de Navie-Stokes.

Atualmente com o grande avanço dos recursos computacionais e a difusão do DSMC, foram desenvolvidos códigos inteligentes que permitem a utilização de intervalos de tempo, tamanhos e formas de célula que se adaptam a valores ótimos durante a simulação, além disso, cada vez mais as simulações tridimensionais, que exigem um número de moléculas relativamente superior ao aplicado neste trabalho, tornam-se possíveis com os benefícios da computação seriada.

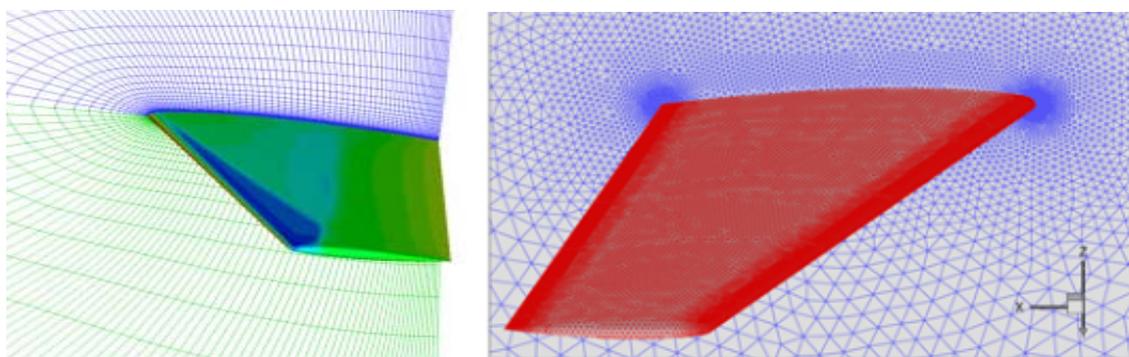


Fig. 5. Exemplo de malhas tridimensionais.

## 4 METODOLOGIA

Aqui são apresentadas as considerações feitas durante as simulações, bem como informações fundamentais para a interpretação e validação dos resultados e análises.

### 4.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO UTILIZADAS

O campo de escoamento bidimensional aplicado possui geometria retangular conforme mostrada na Fig. 6. Duas placas de mesmo comprimento denotado por  $L$  e posicionadas paralelamente a uma distância  $h$  uma da outra compõe o microcanal que está afastado a uma distância  $c$  do contorno inicial do campo, por onde se dá a entrada do gás. Ambas as placas são mantidas a uma temperatura uniforme  $T_w$ , porém a superfície inferior é admitida como difusa ( $\sigma=1$ ) para todos os casos enquanto a superior varia o coeficiente de acomodação ( $\sigma_{up}$ ) de um caso para o outro.

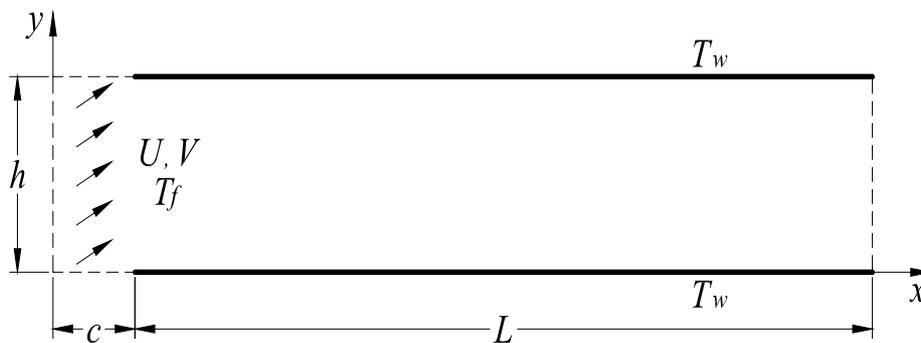


Fig. 6. Geometria do escoamento

Um feixe de moléculas de Nitrogênio diatômico ( $N_2$ ) entra no campo com velocidades iniciais  $U(x)$  e  $V(y)$ , temperatura  $T_f$  e pressão escalar  $p$ . Na tabela 1, seguem relacionados estes parâmetros, bem como os respectivos números

de Knudsen, baseados no feixe livre (gás não perturbado), para cada um dos casos simulados.

Em todas as simulações o número mínimo de moléculas utilizado foi da ordem 500000 partículas distribuídas em uma malha composta por 400x60 células retangulares, resultando em uma média de mais de 20 moléculas por célula. Na direção  $x$  a dimensão das células foi aumentada através de uma suave progressão enquanto na direção  $y$  este valor permanecia constante. O menor valor da razão entre o tempo médio de colisão e o intervalo de tempo (step) utilizado foi 15, além disso, as dimensões características das células utilizadas foram em média 4 vezes maiores que o deslocamento médio das partículas por intervalo de tempo, e aproximadamente 5 vezes menor que o livre caminho médio no feixe livre. Finalmente o valor da razão entre a separação média das colisões e o livre caminho médio ficou entre 0.02 e 0.1, satisfazendo com folga as condições necessárias para aplicação do DSMC.

De acordo com a tabela 1, nas simulações foram definidos dois diferentes números de Knudsen, no qual o de maior valor ( $Kn=0.0536$ ) valida a hipótese do contínuo, e o outro ( $Kn=0.2682$ ) torna necessária uma abordagem molecular. A grande vantagem do DSMC é que ele pode ser aplicado para ambos os casos, desde que as restrições citadas nas seções precedentes sejam respeitadas.

Baseado nas condições de contorno do feixe livre e nas dimensões do microcanal demonstradas, para os casos onde o número de Knudsen é inferior a 0.1, estimamos os números de Reynolds para as velocidades de 0.5, 1000 e 8000 m/s respectivamente como 0.625, 500 e 4000. Como é bem conhecida, a turbulência nos escoamentos está sempre relacionada a elevados números de Reynolds. Para escoamentos em dutos o surgimento deste fenômeno dá-se em torno do número de Reynolds entre 2700 e 4000, enquanto para escoamentos em placas planas em torno de 500000 (MUNSON et al., 2004). Essa faixa de

valores é conhecida como zona de transição entre o regime laminar e turbulento, desta forma para os escoamentos simulados, apenas aqueles com velocidade de 8000 m/s devem apresentar algumas características turbulentas.

Tabela 1: Condições de Contorno dos casos simulados

	$h$	$L$	$U$	$V$	$p$	$T_f$	$T_w$	$\sigma_{up}$	$Kn$
	(mm)		(m/s)		(Tor)	(K)		-	-
<b>Caso 1</b>	0.05	0.49125	0.5	0	15	300	300	0	0.0536
<b>Caso 2</b>	0.05	0.49125	0.5	0	3	300	300	0	0.2682
<b>Caso 3</b>	0.05	0.49125	1000	0	15	300	300	0	0.0536
<b>Caso 4</b>	0.05	0.49125	1000	0	3	300	300	0	0.2682
<b>Caso 5</b>	0.05	0.49125	1000	1000	15	300	300	0	0.0536
<b>Caso 6</b>	0.05	0.49125	1000	1000	3	300	300	0	0.2682
<b>Caso 7</b>	0.05	0.49125	1000	-1000	15	300	300	0	0.0536
<b>Caso 8</b>	0.05	0.49125	1000	-1000	3	300	300	0	0.2682
<b>Caso 9</b>	0.2	1.965	8000	0	3.75	300	300	0	0.0536
<b>Caso 10</b>	0.2	1.965	8000	0	0.75	300	300	0	0.2682
<b>Caso 11</b>	0.05	0.49125	1000	0	15	300	300	0.25	0.0536
<b>Caso 12</b>	0.05	0.49125	1000	0	3	300	300	0.25	0.2682
<b>Caso 13</b>	0.05	0.49125	1000	0	15	300	300	0.50	0.0536
<b>Caso 14</b>	0.05	0.49125	1000	0	3	300	300	0.50	0.2682
<b>Caso 15</b>	0.05	0.49125	1000	0	15	300	300	0.75	0.0536
<b>Caso 16</b>	0.05	0.49125	1000	0	3	300	300	0.75	0.2682
<b>Caso 17</b>	0.05	0.49125	1000	0	15	300	300	1.0	0.0536
<b>Caso 18</b>	0.05	0.49125	1000	0	3	300	300	1.0	0.2682

Para os casos com a altura do microcanal  $h=0.05$  mm, o valor de  $c$  é igual a  $8.75 \times 10^{-3}$  mm, e para  $h=0.2$  mm, o valor de  $c$  é  $3.5 \times 10^{-2}$  mm, de maneira que os comprimentos totais dos campos são 0.5 mm e 2 mm respectivamente.

## 4.2 FLUTUAÇÕES MACROSCÓPICAS

Tanto o escoamento laminar, cujas linhas de corrente comportam-se de maneira regular ao longo do escoamento, quanto o turbulento que apresenta uma vorticidade aleatória tridimensional das componentes de velocidade, possuem importantes papéis nos fenômenos físicos envolvidos no escoamento. Por exemplo, em processos onde a mistura de espécies e a transferência de calor são aspectos importantes, o escoamento turbulento sem dúvida será mais eficiente que o laminar, pois nesta situação, os processos de mistura e troca térmica ocorrem principalmente devido ao movimento irregular do fluido (convecção) e em menor parcela à difusividade molecular, que no caso dos escoamentos laminares é a principal causa dos processos de troca. Por outro lado, o escoamento laminar é desejável quando a perda de carga e os processos citados anteriormente devem ser minimizados.

A turbulência é uma característica do escoamento e não do fluido, além disso, suas propriedades não são controladas em grande parte pelos processos moleculares. Devido à sua natureza macroscópica aleatória, torna-se impossível uma aproximação determinística do problema, justificando assim o uso de métodos estatísticos.

No objetivo de obter resultados plausíveis nos escoamentos turbulentos, decompõem-se as quantidades instantâneas ( $U$ ) em valores médios ( $\bar{U}$ ) e flutuações ( $U'$ ) conforme segue analiticamente para uma das componentes de velocidade do escoamento do microcanal.

$$\bar{U} = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} U(x, y, t) dt \quad (4.1)$$

O intervalo de tempo  $T$  deve ser muito mais longo que o período das flutuações medidas, mas consideravelmente menor que qualquer variação no valor médio. A flutuação é conceitualmente dada pela seguinte expressão:

$$U' = U - \bar{U} \quad (4.2)$$

Quando o valor médio for independente do tempo inicial ( $t_0$ ) as quantidades avaliadas são chamadas de estatisticamente estacionárias. Todos os conceitos acima apresentados podem ser melhores interpretados com auxílio da figura abaixo.

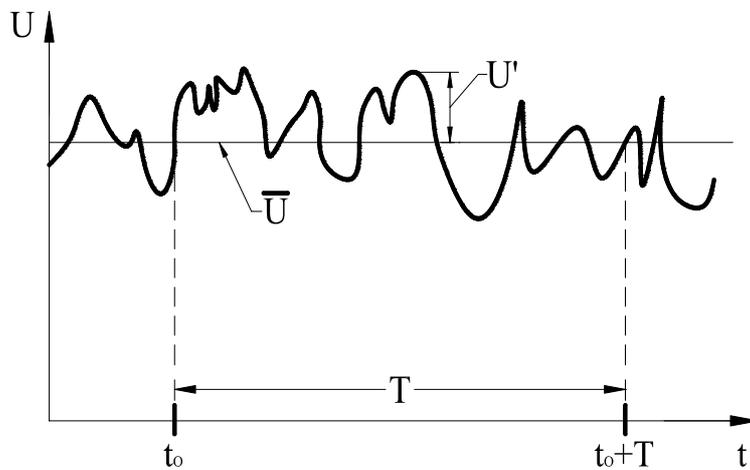


Fig. 7. Velocidade média temporal e suas flutuações

Desta maneira, com os valores das flutuações macroscópicas das propriedades, podem ser definidos inúmeros coeficientes de correlação para medir a intensidade e dimensão da turbulência envolvida no escoamento. Neste trabalho é usada uma razão entre a média do produto das flutuações de velocidade  $U$  das células adjacentes, na direção  $x$  e  $y$ , pelo produto de seus desvios padrões, conforme respectivamente abaixo:

$$UUX_n = \frac{\overline{U'_n \cdot U'_{n+1}}}{\sqrt{\overline{U'^2_n}} \cdot \sqrt{\overline{U'^2_{n+1}}}} \quad (4.3)$$

$$UUY_n = \frac{\overline{U'_n \cdot U'_{n+NCX}}}{\sqrt{\overline{U'^2_n}} \cdot \sqrt{\overline{U'^2_{n+NCX}}}} \quad (4.4)$$

Nesta expressão, o índice  $n$  representa uma célula qualquer, assim como  $NCX$  o número de células por linha na malha aplicada, de forma que para  $UUX$  as células envolvidas são consecutivas na direção  $x$  e para  $UUY$  na direção  $y$ . É interessante ainda notar que o módulo dos valores destas razões tendem a 1 (um) à medida que a distancia entre os pontos analisados tendem a 0 (zero), e o inverso também é válido. Valores positivos destas correlações são relacionados ao fato de que as flutuações ocorrem na mesma direção e valores negativos em direções opostas.

A computação dos dados para o cálculo dos valores médios foi executada após o regime estacionário do escoamento ser atingido, o que consistiu em aproximadamente um sétimo do tempo total de simulação para a maioria dos casos.

## 5 RESULTADOS E ANÁLISES

Baseado nas informações da tabela 1, os resultados dos campos bidimensionais de densidade, velocidade na direção  $x$ , temperatura translacional e rotacional, além das correlações descritas nas equações 4.3 e 4.4 são aqui apresentados. Junto com os campos de correlação são ainda plotados as linhas de correntes pertinentes ao respectivo escoamento.

Com exceção das duas primeiras, as plotagens foram organizadas de forma que para uma mesma escala de legenda constam dois casos simulados com as mesmas velocidades do feixe livre, porém cada um deles é referente a um número de Knudsen. Portanto, apesar da semelhança na velocidade inicial, devido as diferentes pressões atribuídas ao gás, os casos ímpares (1, 3, 5,...) validam a hipótese do contínuo assim como o princípio da aderência enquanto os pares (2, 4, 6,...) que possuem um número de Knudsen elevado devem ter uma abordagem molecular.

Em um segundo momento foram plotados gráficos que contemplam as curvas de pressão e energia ao longo da superfície superior, cuja é difusa, e inferior a qual possui o valor do coeficiente de acomodação ajustado para cada caso, com um incremento de 0.25, conforme já demonstrado na tabela 1. O foco desta segunda análise é avaliar não apenas o impacto deste coeficiente nos campos bidimensionais, mas principalmente a sua influência nas condições das superfícies. Para tais modificações, foram utilizados os caso 3 e 4, que possuem apenas componente  $U$  de velocidade.

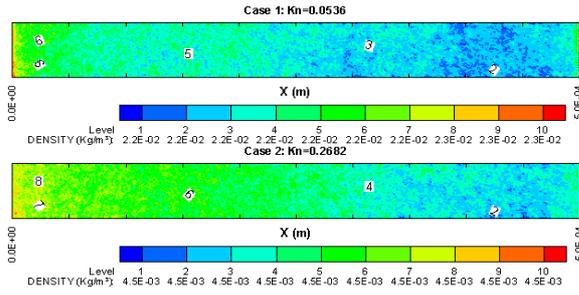


Fig. 8. Densidade - Caso 1 e 2.

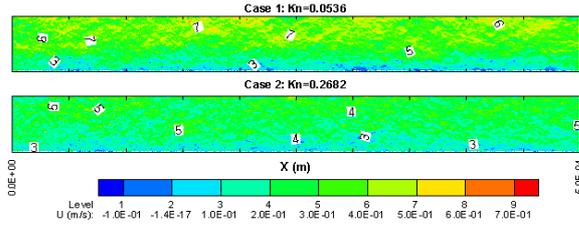


Fig. 9. Velocidade  $U$  - Caso 1 e 2.

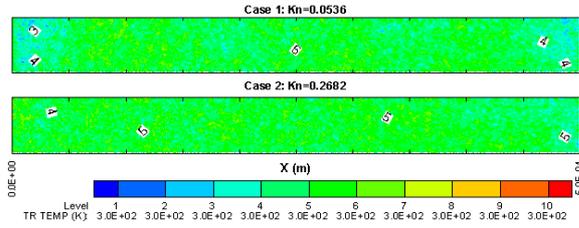


Fig. 10. Temp. mol. translacional - Caso 1 e 2.

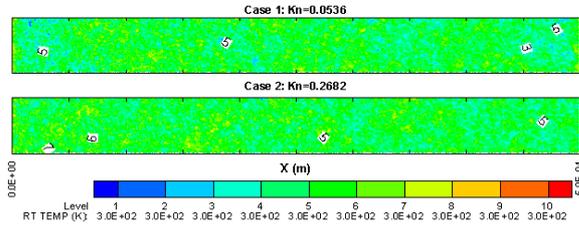


Fig. 11. Temp. mol. rotacional - Caso 1 e 2.

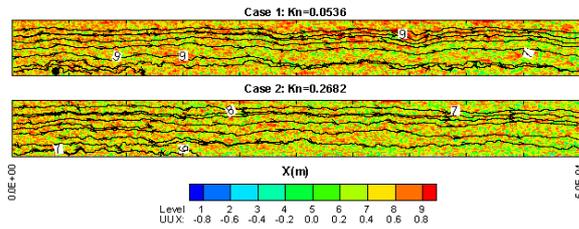


Fig. 12. Correlação  $UUX$  - Caso 1 e 2.

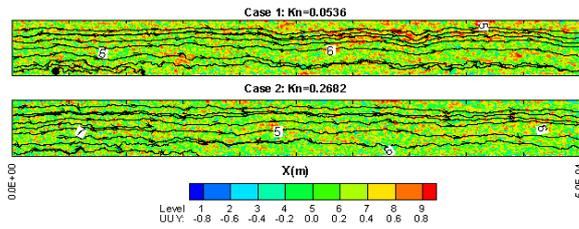


Fig. 13. Correlação  $UUY$  - Caso 1 e 2.

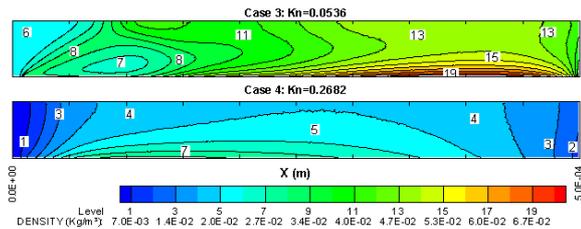


Fig. 14. Densidade - Caso 3 e 4.

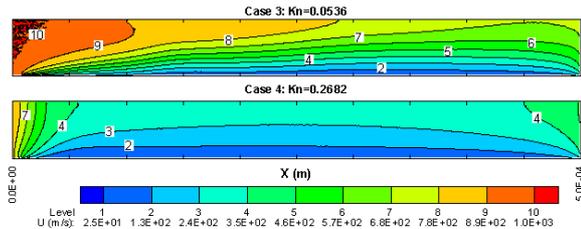


Fig. 15. Velocidade  $U$  - Caso 3 e 4.

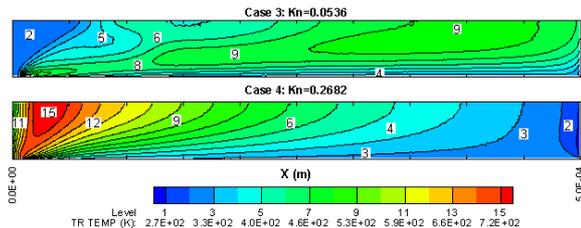


Fig. 16. Temp. mol. translacional - Caso 3 e 4.

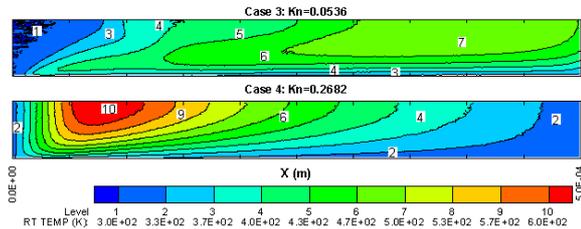


Fig. 17. Temp. mol. rotacional - Caso 3 e 4.

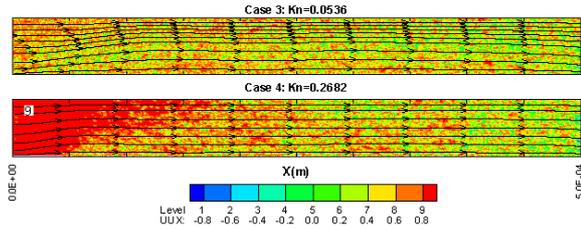


Fig. 18. Correlação  $UUX$  - Caso 3 e 4.

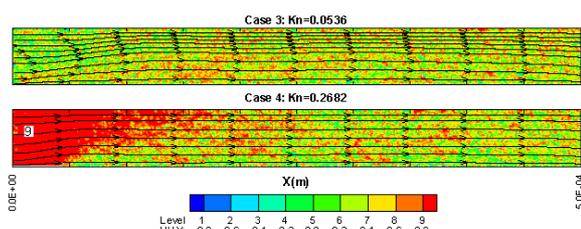


Fig. 19. Correlação  $UUY$  - Caso 3 e 4.

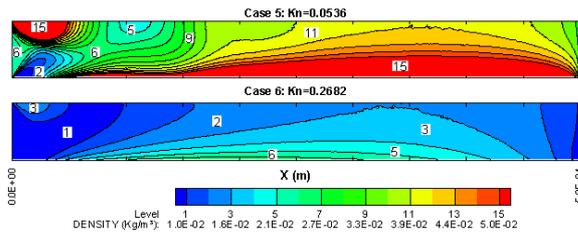


Fig. 20. Densidade - Caso 5 e 6.

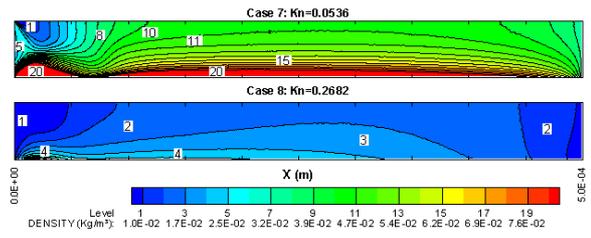


Fig. 26. Densidade - Caso 7 e 8.

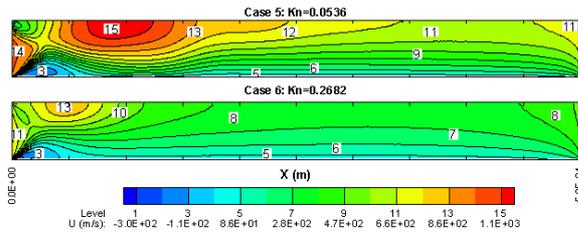


Fig. 21. Velocidade  $U$  - Caso 5 e 6.

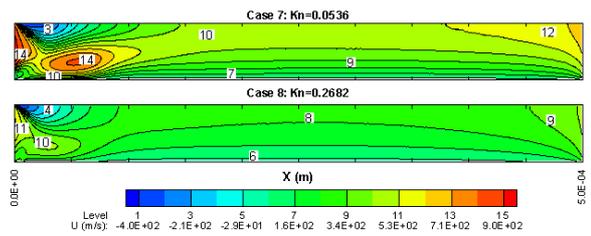


Fig. 27. Velocidade  $U$  - Caso 7 e 8.

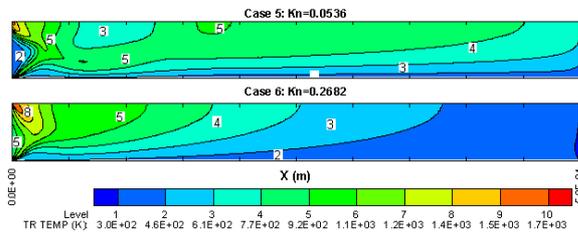


Fig. 22. Temp. mol. translacional - Caso 5 e 6.

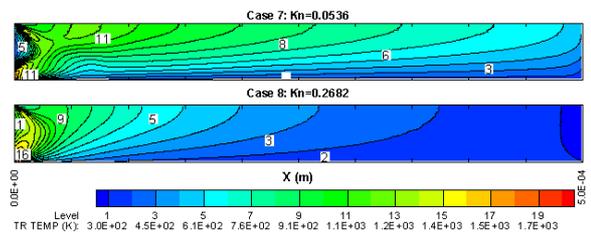


Fig. 28. Temp. mol. translacional - Caso 7 e 8.

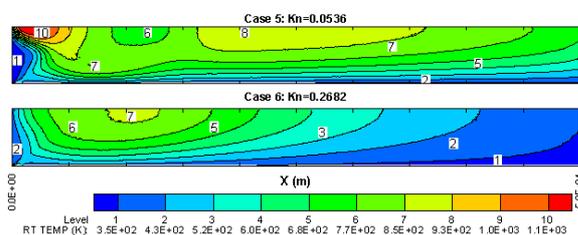


Fig. 23. Temp. mol. rotacional - Caso 5 e 6

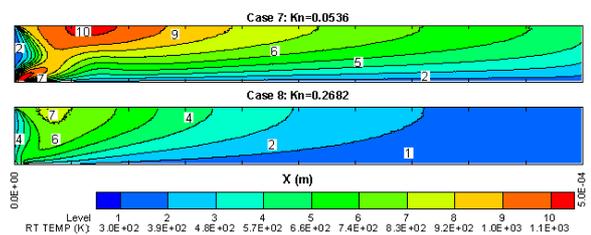


Fig. 29. Temp. mol. rotacional - Caso 7 e 8.

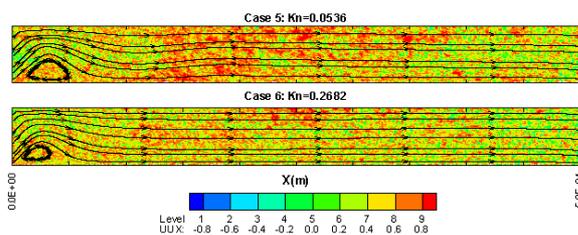


Fig. 24. Correlação  $UUX$  - Caso 5 e 6.

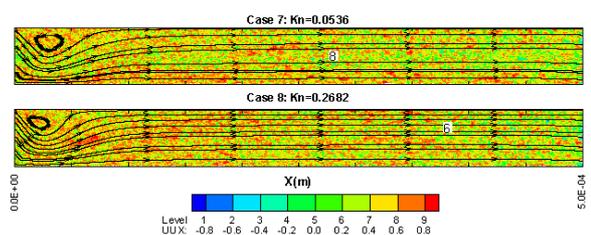


Fig. 30. Correlação  $UUX$  - Caso 7 e 8.

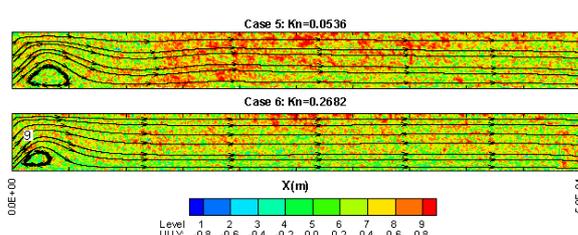


Fig. 25. Correlação  $UUY$  - Caso 5 e 6.

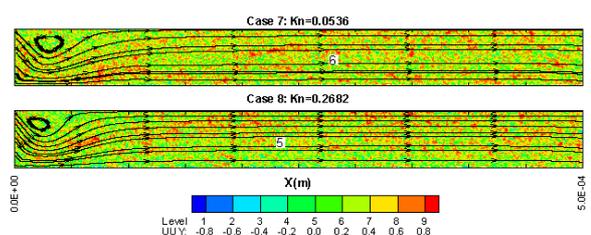


Fig. 31. Correlação  $UUY$  - Caso 7 e 8.

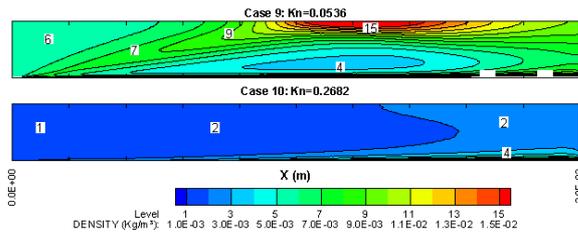


Fig. 32. Densidade - Caso 9 e 10.

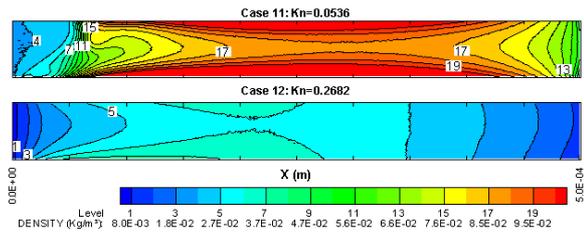


Fig. 38. Densidade - Caso 11 e 12.

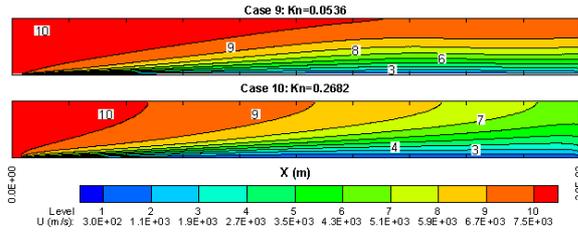


Fig. 33. Velocidade  $U$  - Caso 9 e 10.

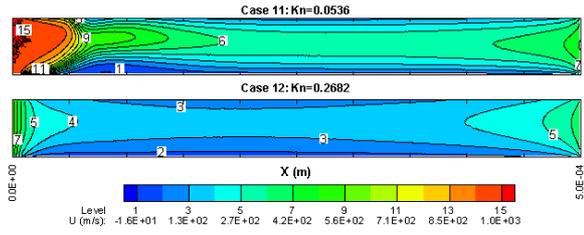


Fig. 39. Velocidade  $U$  - Caso 11 e 12.

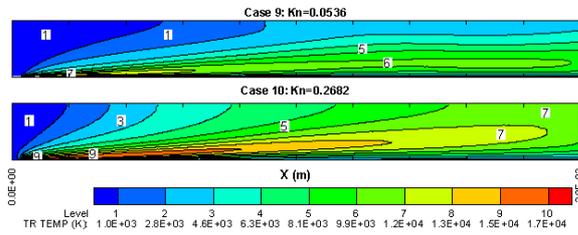


Fig. 34. Temp. mol. translacional - Caso 9 e 10.

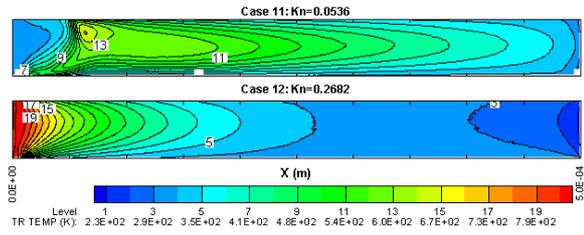


Fig. 40. Temp. mol. translacional - Caso 11 e 12.

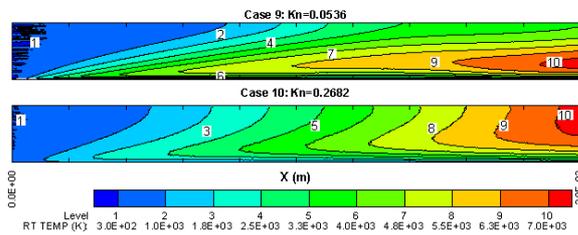


Fig. 35. Temp. mol. rotacional - Caso 9 e 10.

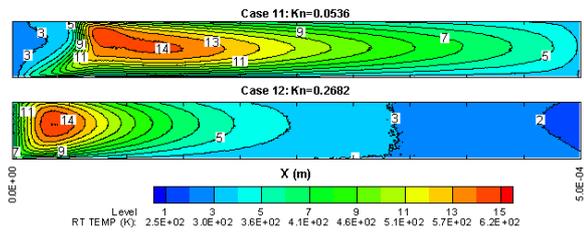


Fig. 41. Temp. mol. rotacional - Caso 11 e 12.

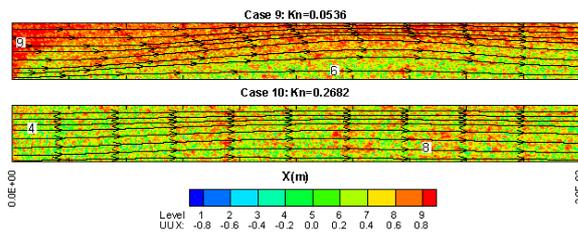


Fig. 36. Correlação  $UUX$  - Caso 9 e 10.

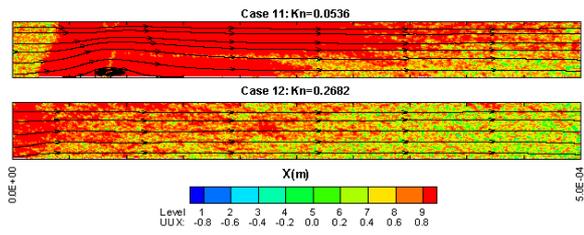


Fig. 42. Correlação  $UUX$  - Caso 11 e 12.

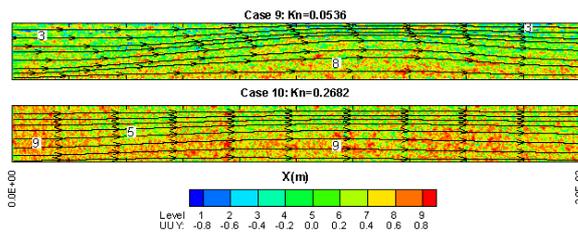


Fig. 37. Correlação  $UUY$  - Caso 9 e 10.

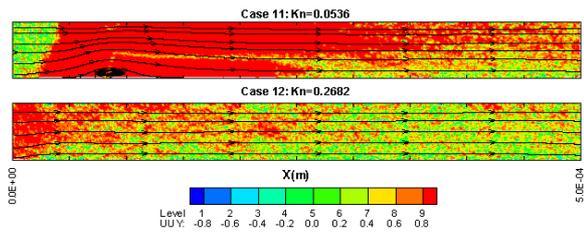


Fig. 43. Correlação  $UUY$  - Caso 11 e 12.

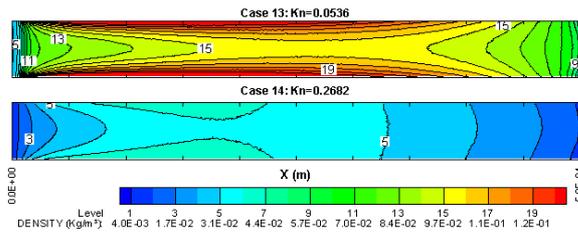


Fig. 44. Densidade - Caso 13 e 14.

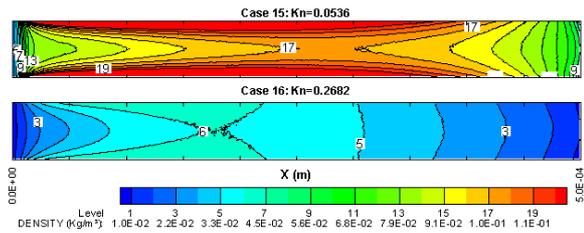


Fig. 50. Densidade - Caso 15 e 16.

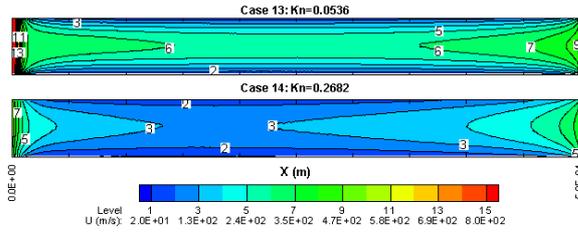


Fig. 45. Velocidade  $U$  - Caso 13 e 14.

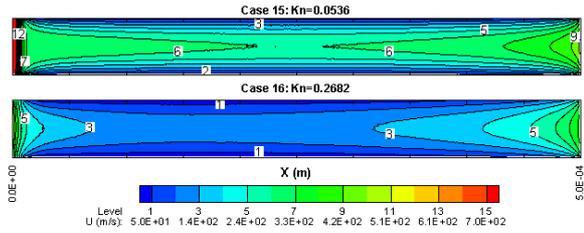


Fig. 51. Velocidade  $U$  - Caso 15 e 16.

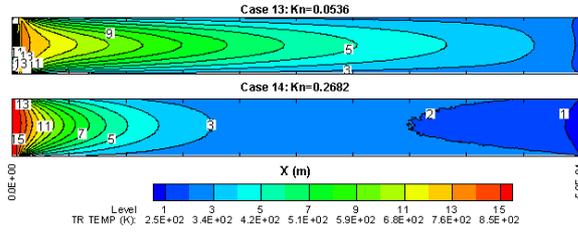


Fig. 46. Temp. mol. translacional- Caso 13 e 14.

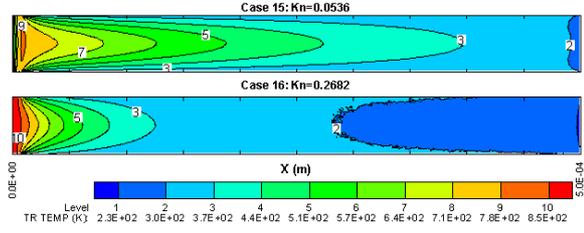


Fig. 52. Temp. mol. translacional- Caso 15 e 16.

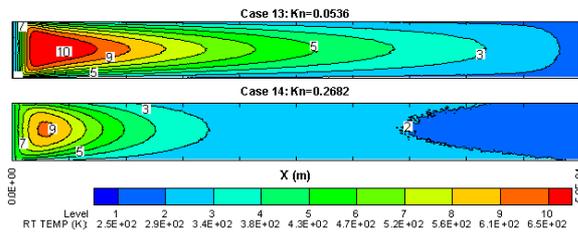


Fig. 47. Temp. mol. rotacional - Caso 13 e 14.

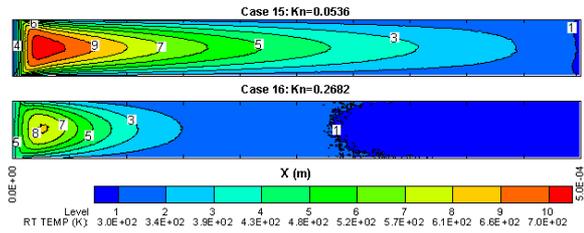


Fig. 53. Temp. mol. rotacional - Caso 15 e 16.

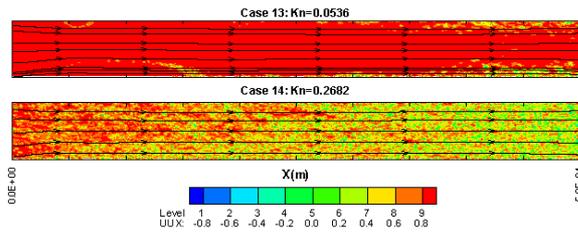


Fig. 48. Correlação  $UUX$  - Caso 13 e 14.

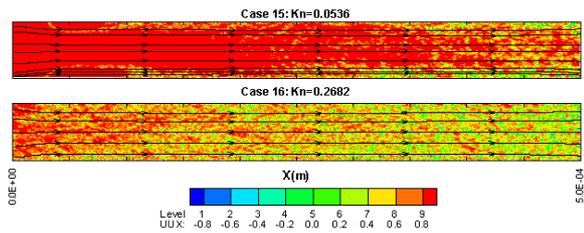


Fig. 54. Correlação  $UUX$  - Caso 15 e 16.

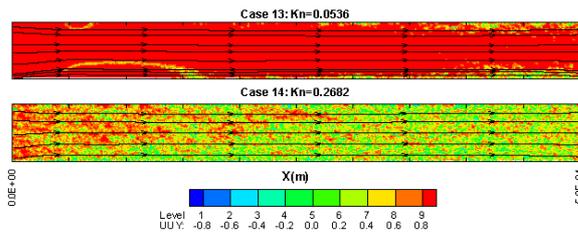


Fig. 49. Correlação  $UUY$  - Caso 13 e 14.

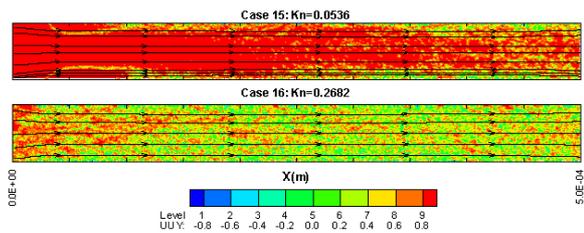


Fig. 55. Correlação  $UUY$  - Caso 15 e 16.

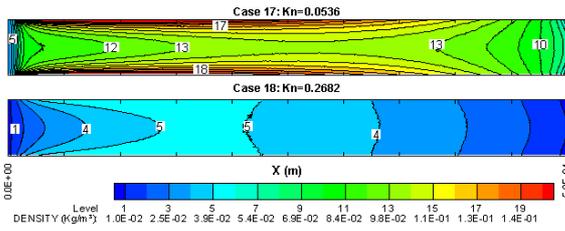


Fig. 56. Densidade - Caso 17 e 18.

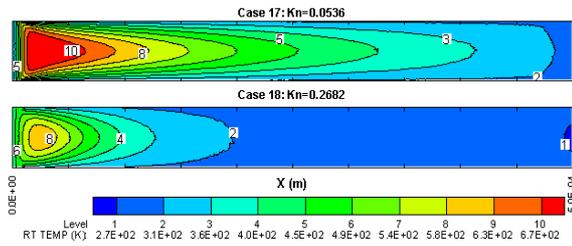


Fig. 59. Temp. mol. rotacional- Caso 17 e 18.

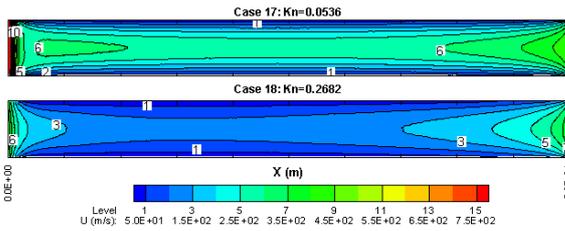


Fig. 57. Velocidade  $U$  - Caso 17 e 18.

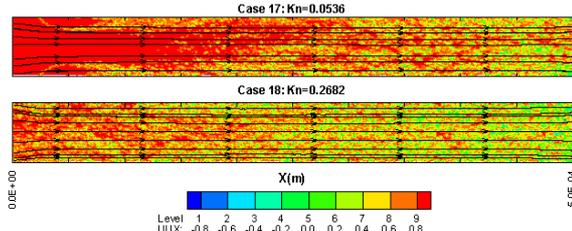


Fig. 60. Correlação  $UUX$  - Caso 17 e 18.

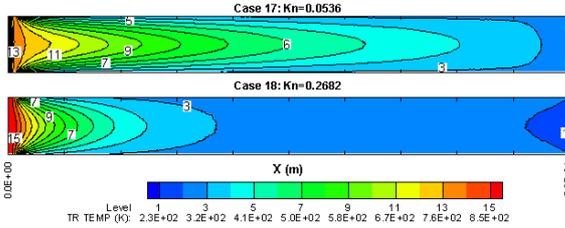


Fig. 58. Temp. mol. translacional-Caso 17 e 18.

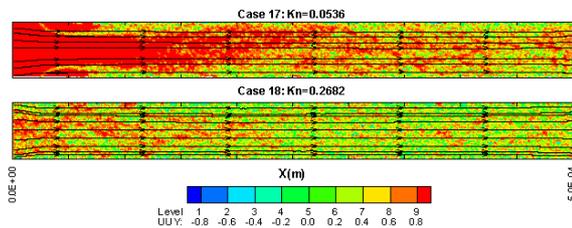


Fig. 61. Correlação  $UUY$  - Caso 17 e 18.

### Campos de densidade

No caso 4 ( $Kn=0.2682$ ), para uma análise feita sobre a entrada do microcanal, a densidade do feixe livre sofre maiores perturbações em relação ao caso 3, que pode ser classificado como contínuo. Após a entrada do microcanal nota-se consideráveis diferenças entre o perfil das ondas de densidade para os casos 3 e 4, a ponto de no caso 3 observar-se à formação de uma ilha, com baixos valores, próxima a parede inferior. Além disso, a intensidade dos gradientes formados nesta parede que é difusa são inferiores aos do caso 4. Como já era de se esperar, de uma forma geral, o escoamento rarefeito apresenta menores valores de densidade causados pelas diferentes pressões impostas ao feixe livre.

Para os casos 5 e 6, cujas moléculas são direcionadas à parede especular, observa-se um aumento da densidade na região onde as linhas de corrente se colidem diretamente com a superfície superior. No caso 5 nota-se também que a região que comporta o vórtice e a região ao lado do pico de densidade apresentam valores inferiores. Ainda para o caso 5, assim que as linhas de corrente deixam de apresentar componente  $V$  de velocidade, há uma extensa zona adjacente à parede difusa com elevados valores de densidade. No geral, os casos rarefeitos ( $Kn=0.2682$ ) apresentaram menores perturbações e gradientes de densidade.

Os casos 7 e 8, que apesar da componente de velocidade  $V$  do feixe livre ser negativa com relação ao eixo  $y$ , mostra que o campo de densidade para o caso 8 é muito semelhante ao do caso 6, exceto pela ilha na superfície especular. O caso 7 apresenta uma região na entrada do microcanal com valores superiores ao caso 5, na zona em que as linhas de corrente do feixe livre interagem diretamente com a superfície, ou seja, próxima à parede difusa estão maiores densidades. O vórtice do caso 7 também se situa em zonas de baixa densidade. A maior diferença entre este caso e o caso 5 é que a camada de elevada densidade, que se estende sobre a superfície difusa, é mais estreita e apresenta valores de densidade aproximadamente 50% maiores.

Nos casos 9 e 10, houve um aumento não apenas na velocidade do feixe livre, mas também na dimensão do canal. Observa-se que com este aumento de velocidade a ilha moveu-se na direção positiva de  $x$  e seu tamanho foi ampliado, porém para este caso surge uma região com elevados valores de densidade exatamente acima da ilha, acarretando em gradientes extremamente elevados. Já o caso 10 não apresentou mudanças representativas, a não ser o fato que após a metade do microcanal nota-se um perfil aparentemente simétrico com um pequeno aumento de densidade na parede difusa.

Nota-se a partir dos casos 11 e 12, cujos são uma variação dos casos 3 e 4, como já afirmado anteriormente, que com o aumento de  $\sigma_{up}$  para 0.25 tem-se a formação de um campo de densidade quase simétrico, e em especial no caso 11 ( $Kn=0.0536$ ), apesar de uma certa deformação do perfil na entrada do microcanal, a densidade nas paredes é relativamente superior ao caso 3. Além disso, o caso 11 foi o único dentre as modificações do caso 3 que apresentou a formação de um vórtice na entrada do microcanal, o qual está associado a grande diferença nas tensões de cisalhamento das superfícies, pois no caso 3 apenas a parede inferior exercia força viscosa sobre o fluido.

Com o aumento da acomodação na parede superior, ocorre uma maior adesão das moléculas nas duas superfícies do canal, e as forças viscosas deixam de agir apenas em dos lados e desaceleram as moléculas causando o aumento de densidade observado.

Nos casos 13 e 14, onde  $\sigma_{up}$  é igual a 0.5 não é mais possível observar qualquer assimetria nos campos, independentemente do valor de Knudsen. De forma geral a medida que o valor de  $\sigma_{up}$  tende a 1, a densidade nas paredes também sofre uma aumento que pode chegar ao dobro dos valores presentes nos caso com  $\sigma_{up}$  igual 0 (parede especular).

Com base nas análises acima, podemos dizer que a parede difusa está relacionada a maiores densidades, acarretando em consideráveis gradientes. Este fato ocorre de forma mais acentuada nos casos com baixo número de Knudsen e elevados números de Reynolds. Além disso, à medida que aumentasse o número de Reynolds, a região com maiores gradientes deslocasse na direção de  $x$ .

Desde que a diferença entre o coeficiente de acomodação das paredes seja menor que 0.5 não haverá assimetria no campo de densidade, porém para projetos de microcanais que necessitam ser montados com diferentes materiais,

cujos não atendam a condição citada, é de extrema importância uma avaliação mais detalhada dos efeitos do desequilíbrio entre os valores de densidade das duas paredes. Contudo, para as situações onde o número de Knudsen é baixo e há uma diferença nos coeficientes de acomodação da ordem de  $\frac{3}{4}$ , pode surgir a formação de vórtices, cujo é um fenômeno que muitas vezes contribui para perdas de carga, bem com processos de mistura.

### *Campos de Velocidade $U$*

Nos casos 3 e 4, a componente de velocidade  $U$  adjacente à parede difusa apresenta valores próximos de zero, validando para o caso contínuo e rarefeito o princípio da aderência, porém para  $Kn=0.2682$  esta região é mais espessa, enquanto para  $Kn=0.0536$ , pode-se notar a formação de uma camada limite fluidodinâmica, onde  $U$  varia de 0 até valores próximos da velocidade do feixe livre, semelhante àquela observada em escoamentos sobre placas planas abertas (MUNSON et al., 2004), isso pois a parede especular não oferece nenhuma tensão de cisalhamento ao escoamento do gás.

Para os casos 5, 6, 7 e 8 semelhantes aos campos de densidade, observam-se duas ilhas na entrada do microcanal. As regiões de maior densidade estão relacionadas às zonas com maiores velocidades e vice-versa, como por exemplo, a região dos vórtices que abrangem baixas densidade e velocidades entre -350 e 0 m/s. Os vórtices que são formados sobre as paredes difusas para  $Kn=0.0536$  são suavemente maiores que para os casos opostos. Também é nítido que os gradientes de velocidade  $U$  são maiores para os casos onde  $Kn=0.0536$ , e em geral após um terço do comprimento do canal o escoamento não apresenta mais mudanças significativas, e a velocidade na parede difusa tende a zero em uma estreita camada, não sendo aparente qualquer assimetria ou formação nítida da camada limite.

Os casos 9 e 10 apresentaram muita semelhança quanto à magnitude dos gradientes envolvidos, e assim como nos outros casos na parede especular a velocidade tende a zero. As principais diferenças observadas são referentes ao perfil das isolinhas, e ao fato de que para  $Kn=0.0536$ , praticamente a metade superior do microcanal está submetida apenas a velocidades acima de 6700 m/s.

Observa-se a partir do caso 11 que com o aumento de  $\sigma_{up}$ , o perfil de velocidade também torna-se cada vez mais simétrico, que é devido ao aumento da aderência desta parede com os feixes, assim a velocidade tende a menores valores. Porém essas mudanças não são mais tão significantes para  $\sigma_{up}$  maior que 0.5.

Sobre os campos de velocidade apresentados, podemos concluir de maneira geral, que próximo à parede difusa, os valores de velocidade tendem a zero. Para menores números de Knudsen o escoamento apresenta maiores gradientes quando Reynolds é menor ou igual a 500, enquanto para Reynolds igual a 4000 a diferença fica por parte do perfil de velocidade e não da magnitude dos gradientes. Devido ao menor número de colisões e ao elevado livre caminho médio presente nos casos rarefeitos, a troca de quantidade de movimento dá-se de forma menos intensa e homogênea, pois nestas condições as moléculas podem viajar de uma parede à outra tornando a diferença entre os coeficientes de acomodação menos significativa para o perfil do campo e resultando em menores gradientes.

### *Campos de Temperatura Translacional e Rotacional*

Analisando os casos 3 e 4, diferentes dos campos de densidade e velocidade, com o aumento do número de Knudsen, também se aumenta a intensidade dos gradientes de temperaturas. Em ambos os casos, próximo à parede difusa as

temperaturas tendem ao valor da temperatura de referencia da parede (300 K), ao contrário da parede superior. No caso 4, as isolinhas se comportam de forma mais ordenada e facilmente nota-se uma região com elevados valores de temperatura translacional e rotacional imediatamente após a entrada do microcanal.

Há uma extrema semelhança entre o perfil do campo translacional e rotacional, uma vez que ambos são funções da energia da molécula. Porém para ativar o modo rotacional a molécula necessita atingir elevados níveis de energia, que são normalmente provenientes das colisões com moléculas ou superfícies com maior valor energético. A afirmação anterior é uma tentativa de justificar o fato do pico da temperatura translacional ser antes do pico de temperatura rotacional no caso 4. Além disso, tanto o modo translacional quanto o rotacional possuem valores superiores na parede especular, pois a mesma não ajusta a energia das moléculas de acordo com a temperatura da parede (300 K), diferente da parede difusa (inferior).

Nos casos com  $Kn=0.0536$  como número de colisões é maior é de se esperar uma maior homogeneidade e equilíbrio nos campos de temperatura, de forma que os valores presentes não sejam muito superiores ao do feixe livre. Apenas no caso 3 ocorre um suave aumento das temperaturas na direção positiva de  $x$ , enquanto para o caso 4 há uma redução relativamente acentuada.

Uma característica comum para os casos 5, 6, 7 e 8 é a formação de regiões com temperaturas superiores a do feixe livre pouco após a entrada do microcanal, sendo que estes gradientes são ainda mais intensos para  $Kn=0.0536$ . Novamente a superfície difusa ajusta as temperaturas para valores próximos a 300 K. O fato de o feixe livre estar a  $45^\circ$  ou  $-45^\circ$  não alterou significativamente os campos de temperatura, havendo uma grande semelhança entre os casos 5 e 7 e os casos 6 e 8.

Para os casos 9 e 10, com o aumento de Reynolds, as ilhas referentes aos valores de temperatura rotacional máximos deslocaram-se para o final do microcanal, e ao contrário dos casos anteriores ocorre um aumento das temperaturas na direção positiva de  $x$ .

Com o aumento de  $\sigma_{up}$  e conseqüentemente da simetria do campo, como era de se esperar, as ilhas com os valores máximos deixaram de estar na parede especular e passaram a se situarem de forma centralizada com relação à altura do microcanal. Assim como nos casos anteriores os valores máximos de temperatura translacional apresentaram-se à montante dos valores máximos de temperatura rotacional. Apesar da diferença no perfil dos campos com  $\sigma_{up} = 1$  e  $\sigma_{up} = 0$ , a magnitude das temperaturas envolvidas permaneceram praticamente as mesmas.

Assim, para os campos de temperaturas, concluímos que devido à diferença entre os coeficientes de acomodação, os valores máximos estiveram concentrados na parede especular e logo após a entrada do microcanal. Observou-se ainda um considerável equilíbrio nos valores de temperatura para Reynolds menor ou igual a 500, entretanto para Reynolds igual a 4000 a temperatura translacional apresenta valores aproximadamente 2,5 vezes maiores que a rotacional, ou seja, o código não correspondeu ao equilíbrio esperado entre os modos internos de energia, para elevados valores de temperatura translacional. E ainda, que a direção do feixe livre não afetou significativamente o campo de temperaturas.

Independente da configuração das paredes que formam o microcanal, uma vez que este for dimensionado para suportar as temperaturas máximas, não haverá surpresas, o que pode ocorrer é fato de uma parede ficar muito mais aquecida que a outra se a diferença entre os coeficientes de acomodação for superior a 0.5.

## Campos de Correlação

Em geral os campos apresentaram resultados de correlação muito próximos de zero, o que atende a expectativa dos baixos números de Reynolds utilizados, que são relacionados aos escoamentos laminares, e ainda ao fato de que os escoamentos plotados são estáveis, de forma que as flutuações realmente devam tender a zero. Portanto apesar de em alguns casos como, por exemplo,  $UUX$  do caso 4 e 9 e  $UUY$  do caso 4, terem sido observados valores próximos de 1 ( $\mu\text{m}$ ) na entrada do microcanal e na parede superior que é especular, esses resultados não podem ser utilizados para análises mais profundas, pois apesar do coeficiente ser próximo de 1 ( $\mu\text{m}$ ), a magnitude dessas flutuações, ou seja, o valor numérico dos numeradores das equações 4.3 e 4.4, são muito baixos pois se refere a escoamento laminares e estáveis, cujos são confirmados pela não aleatoriedade presente nas respectivas linhas de corrente.

A partir deste ponto, as análises deixam de ser focadas nos campos bidimensionais e visam as curvas de pressão e energia referente as superfícies que tiveram o valor de  $\sigma_{up}$  modificado. Para tal interpretação, segue a legenda que relaciona as propriedades analisadas.

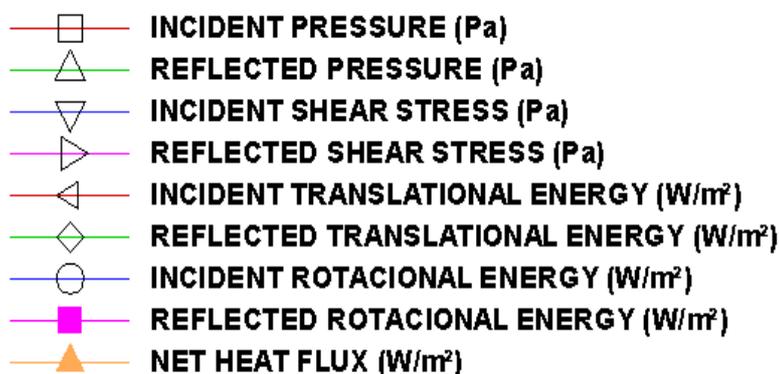


Fig. 62. Legenda das propriedades das superfícies.

A pressão incidente, nada mais é que a razão entre a soma da quantidade de movimento normal das moléculas que incidem na superfície e o produto do intervalo de tempo simulado e da unidade de área do elemento de superfície em questão. A pressão refletida é baseada no mesmo conceito, porém esta considera a quantidade de movimento das moléculas que são refletidas após colidirem com a superfície. Utilizando ainda a mesma idéia, temos as tensões de cisalhamento que seguem o princípio das pressões incidente e refletida, mas envolvem apenas a parcela tangencial à superfície da quantidade de movimento total das moléculas.

Quanto aos termos relacionados à energia temos as energias translacional e rotacional molecular incidente e refletida, que são pertinentes aos estados de pré e pós-colisão respectivamente. A curva de fluxo calor líquido representa a soma dessas quatro parcelas de fluxo de energia citadas.

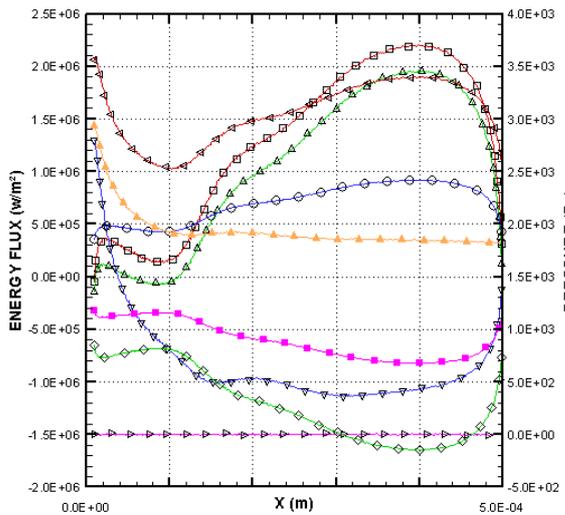


Fig. 63. Superfície Inferior - Caso 3.

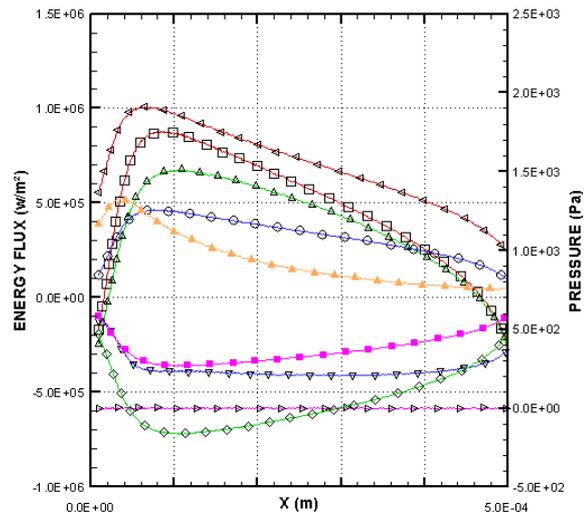


Fig. 66. Superfície Inferior - Caso 4.

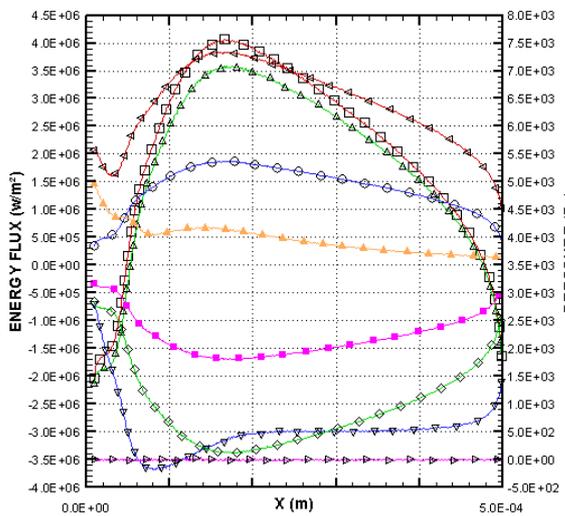


Fig. 64. Superfície Inferior - Caso 11.

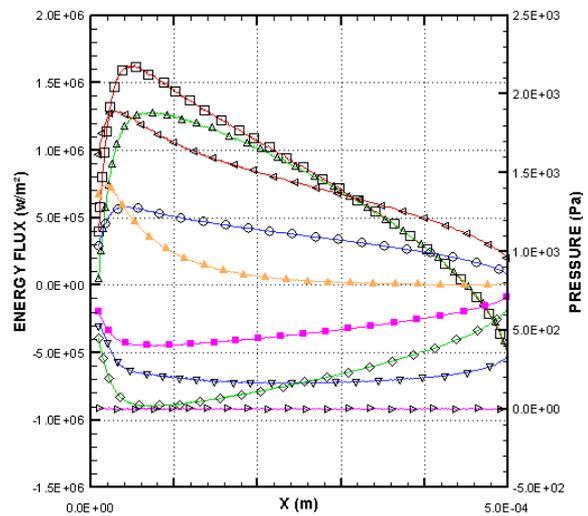


Fig. 67. Superfície Inferior - Caso 12.

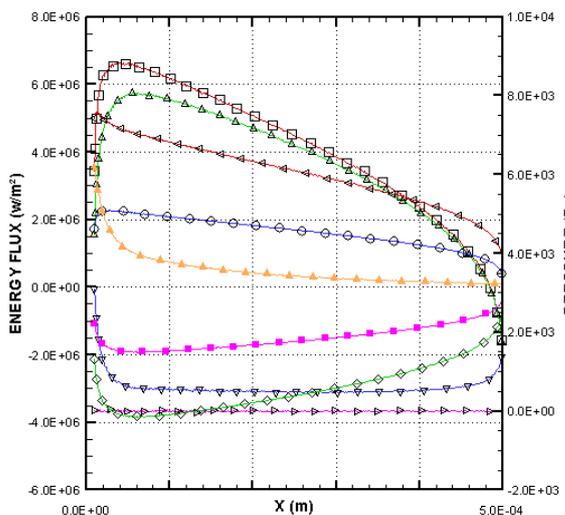


Fig. 65. Superfície Inferior - Caso 13.

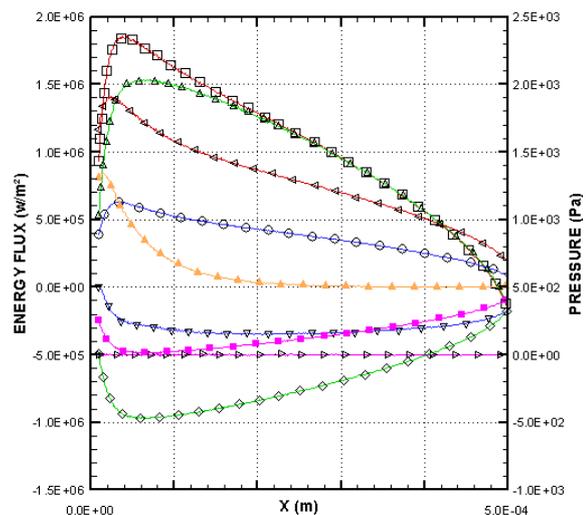


Fig. 68. Superfície Inferior - Caso 14.

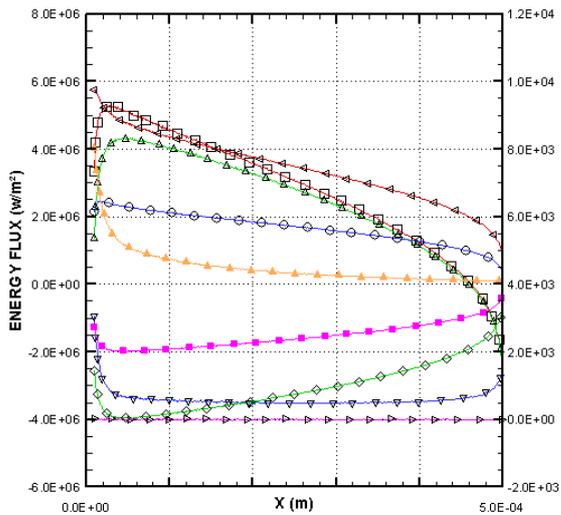


Fig. 69. Superfície Inferior - Caso 15.

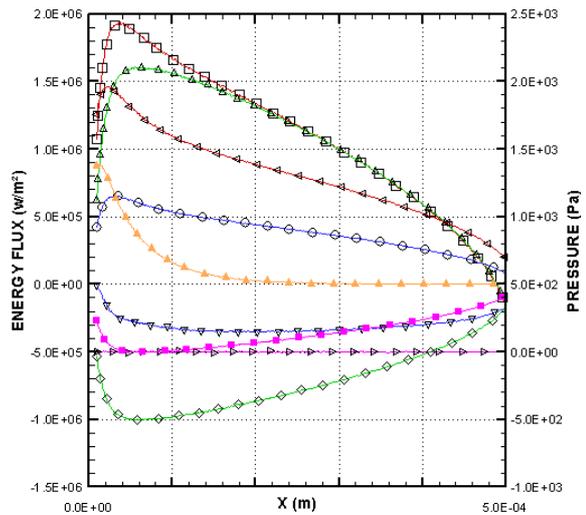


Fig. 72. Superfície Inferior - Caso 16.

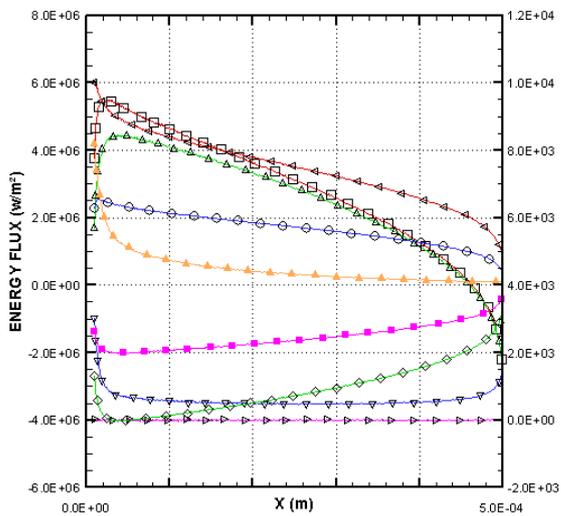


Fig. 70. Superfície Inferior - Caso 17.

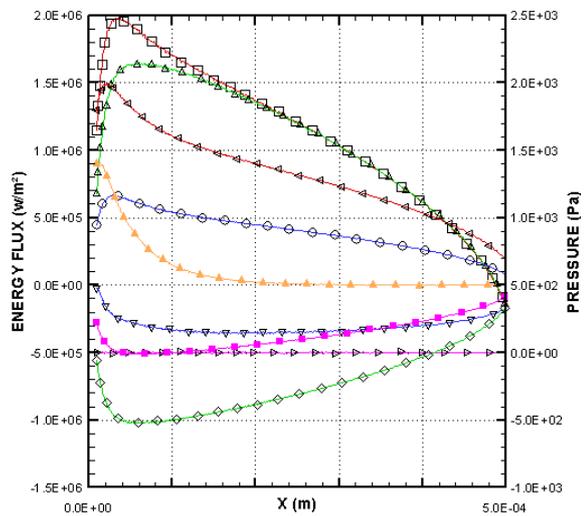


Fig. 73. Superfície Inferior - Caso 18.

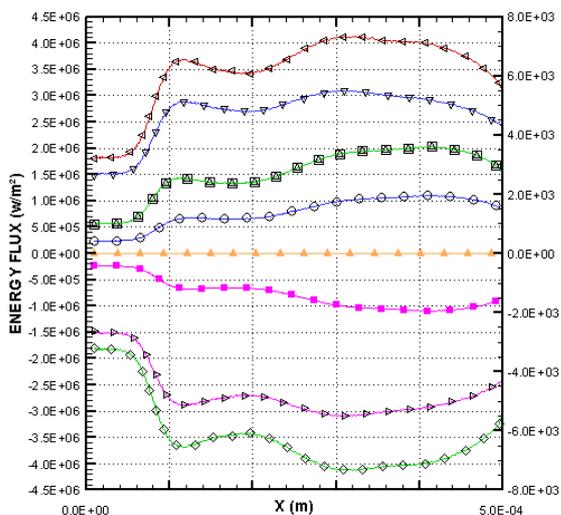


Fig. 71. Superfície Superior - Caso 3.

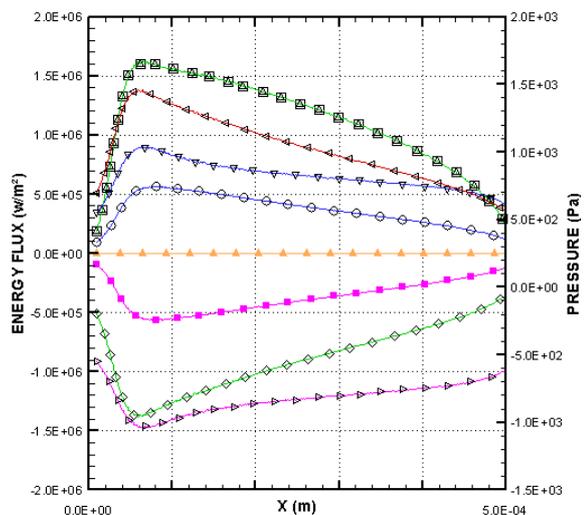


Fig. 74. Superfície Superior - Caso 4.

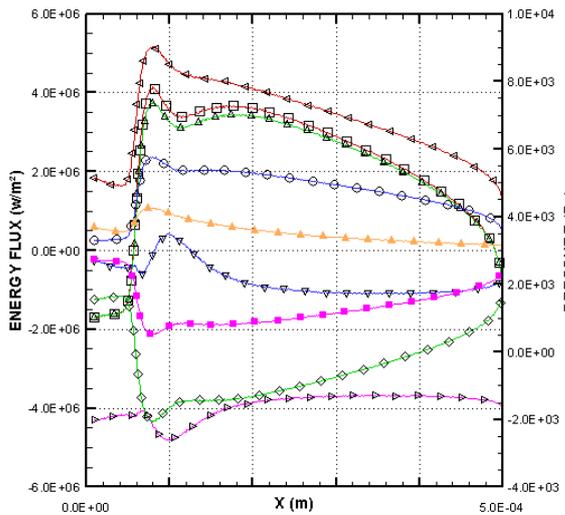


Fig. 75. Superfície Superior - Caso 11.

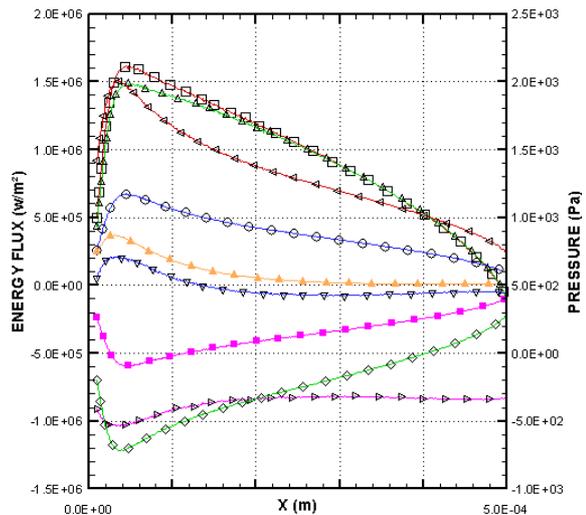


Fig. 78. Superfície Superior - Caso 12.

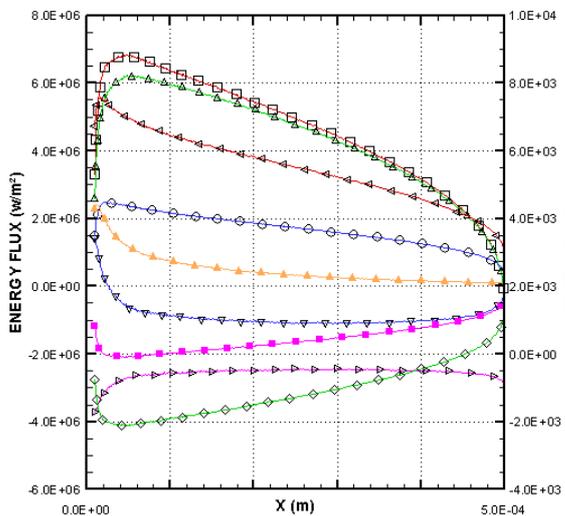


Fig. 76. Superfície Superior - Caso 13.

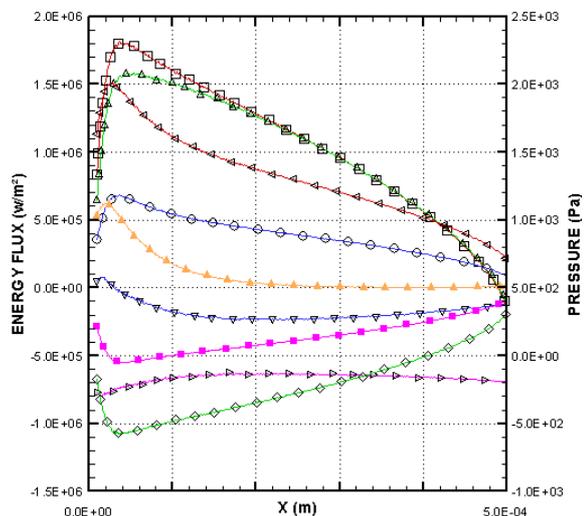


Fig. 79. Superfície Superior - Caso 14.

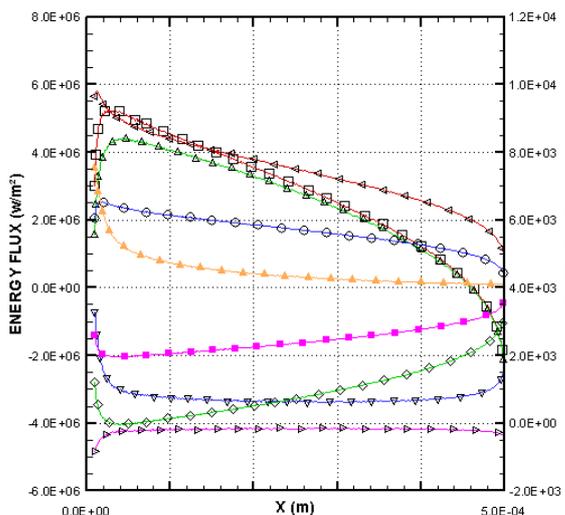


Fig. 77. Superfície Superior - Caso 15.

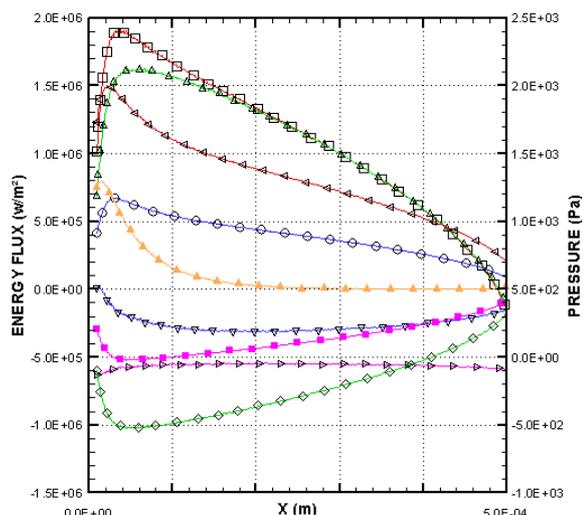


Fig. 80. Superfície Superior - Caso 16.

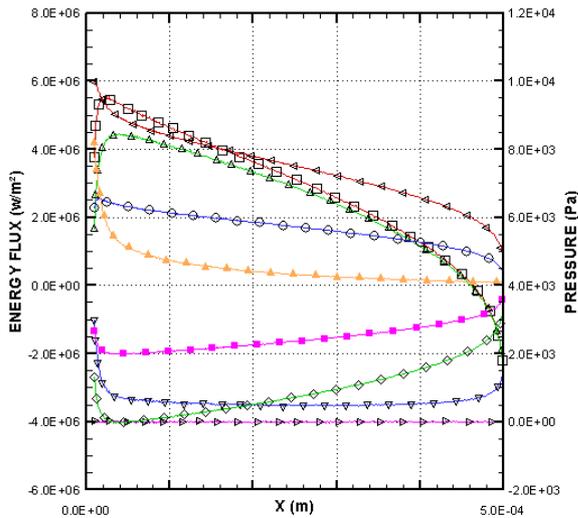


Fig. 81. Superfície Superior - Caso 17.

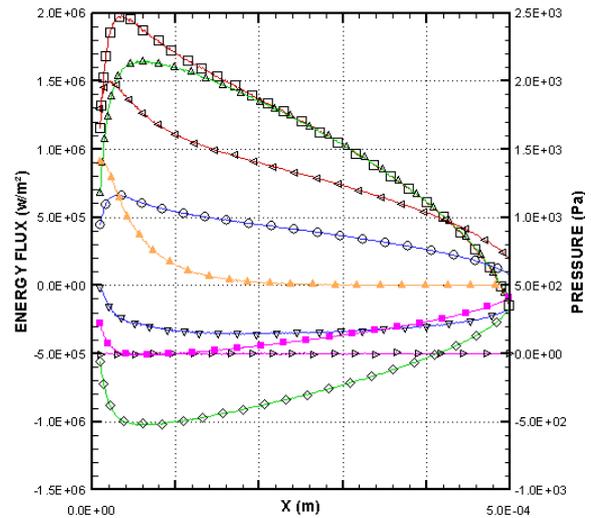


Fig. 82. Superfície Superior - Caso 18.

### *Pressões Incidente e Refletida - Superfície Inferior*

Observando as figuras referentes à superfície inferior, cuja foi considerada difusa ( $\sigma=1$ ) em todos os casos, nota-se nas simulações onde  $Kn=0.0536$  que os picos de pressão incidente deslocam-se na direção da entrada do microcanal à medida que o valor de  $\sigma_{up}$  aumentava. Além disso, com o aumento do coeficiente de acomodação da parede superior a magnitude destes picos de pressão também aumentou, de forma que estes valores chegam a dobrar quando  $\sigma_{up}$  passa de 0 para 0.25, já para  $\sigma_{up} = 0.5, 0.75$  e 1, a intensidade dos picos de pressão não sofre mudanças significativas, e de maneira geral os valores de pressão incidente são suavemente superiores ao da pressão refletida.

Agora analisando a superfície inferior para os casos com  $Kn=0.2682$  percebe-se um comportamento semelhante àqueles com  $Kn=0.0536$ , porém com o aumento do valor de  $\sigma_{up}$  os picos não variam na mesma proporção dos casos ímpares.

### *Tensões de Cisalhamento Incidente e Refletida - Superfície Inferior*

Para todos os casos da superfície inferior a tensão de cisalhamento refletida foi praticamente nula por toda a extensão do microcanal, pois como esta é considerada difusa, a molécula é refletida com direção aleatória e energia ajustada pela temperatura da superfície (300 K), ou seja, as moléculas são refletidas com uma velocidade praticamente nula (princípio da aderência), tornando consistentes os resultados já discutidos dos campos de velocidade.

De maneira geral, para os dois valores de Knudsen envolvidos, o valor da tensão de cisalhamento incidente cai após a entrada do microcanal, em seguida estabilizando. Essa queda ocorre de forma mais brusca para os casos com  $Kn=0.0536$ , pois são neles que estão presentes os maiores gradientes. Essa redução na entrada é associada ao fato de que a molécula proveniente do feixe livre, cujo possui neste caso uma velocidade macroscópica de 1000 m/s, é desacelerada pela superfície difusa, isto é, antes da entrada do microcanal a velocidade das moléculas é elevada, resultando em uma quantidade de movimento tangencial elevada. Um fato importante é que apenas o caso 11 apresentou valores de tensão de cisalhamento incidente negativos, de forma que a queda destes valores foi tão acentuada que causou o surgimento de um vórtice, pois houve um “descolamento” das linhas de corrente inferiores, que deixaram de aderir à parede, assim causando uma diferença de forças viscosas entre as linhas de corrente superiores, que foi suficiente para rotacionar a porção de fluido.

### *Pressões Incidente e Refletida - Superfície Superior*

Para a superfície superior as curvas se comportaram da mesma forma e com a mesma magnitude da superfície inferior, e como esperado o valor da pressão incidente e da refletida foram idênticos para  $\sigma_{up} = 0$ . Apenas o caso 11 apresentou uma instabilidade após a entrada do microcanal, que é atribuída a formação do

vórtice. Assim para os valores de  $\sigma_{up}$  maiores ou iguais a 0.5 as diferenças entre essas curvas não são significativas.

#### *Tensões de Cisalhamento Incidente e Refletida - Superfície Superior*

Para os casos 3 e 4 as curvas apresentaram perfeita simetria, uma vez que a parede especular apenas inverte a direção normal da velocidade das moléculas, justificando assim os valores negativos de tensão de cisalhamento refletida, que nada são quer o oposto da incidente, e não possuem significado físico. À medida que  $\sigma_{up}$  aumenta essa simetria diminui e os valores de tensão de cisalhamento refletida tendem a zero assim como nas superfícies superiores. Aparentemente o número de Knudsen não afetou o perfil destas curvas, e sim apenas a magnitude das mesmas, uma vez que essas pressões são função da densidade como já afirmado anteriormente.

#### *Fluxo de Energia - Superfície Inferior*

As curvas de energia rotacional incidente e refletida também apresentaram simetria, de forma que podemos pré concluir que para as condições estudadas, a parede difusa, cuja está a 300 K, não fornece energia suficiente às moléculas para ajustar a energia rotacional, de forma que as mudanças nesse grau de liberdade da molécula são causados principalmente pelas interações com outras partículas. Esse modo de energia ainda diminui na direção  $x$  do microcanal.

Por outro lado, a energia translacional incidente é ajustada para valores consistentes com a temperatura da superfície (300 K), sendo que de maneira geral a energia translacional da molécula é reduzida ao se colidir com a superfície ao longo do escoamento. Portanto como os valores de energia são reduzidos na direção à jusante, o fluxo de calor aumenta na direção contrária, isto é, a energia é

entregue à parede que se encontra com valores menores de energia. Esse fluxo aumenta a medida que os campos tendem a uma condição de simetria ( $\sigma_{up} \rightarrow \sigma$ ). Contudo, para valores de  $\sigma_{up}$  menores ou igual a 0.5 as mudanças nas curvas de energia da parede inferior são mínimas.

#### *Fluxo de Energia - Superfície Superior*

Novamente para os casos 3 e 4 as curvas de energia incidentes e refletidas são simétricas e o fluxo de calor é nulo. Para  $Kn=0.0536$  as curvas ocorrem de forma semelhante a um sinal de degrau, enquanto para  $Kn=0.2682$  as variações são praticamente lineares.

Para os demais casos, as curvas se comportaram da mesma forma relatada para a superfície inferior. Além disso, fica visível que com o aumento de  $\sigma_{up}$ , a taxa de variação da curva de fluxo de calor líquido em função de  $x$ , aumenta na entrada do microcanal.

Com essas análises podemos dizer que as mudanças presentes nas curvas, para baixos números de Knudsen, são mais bruscas, e como era de se esperar as magnitudes de pressão e energia para  $Kn=0.0536$  são superiores às aquelas com  $Kn=0.2682$ , pois essas duas propriedades são proporcionais à massa específica do gás.

## 6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

As superfícies difusas estão relacionadas às regiões de maiores densidades, mas de menores temperaturas e velocidades. De forma geral os gradientes dessas propriedades são maiores nos casos com baixo  $Kn$ , resultando em menores espessuras das ondas de choque. O aparecimento de assimetria nos campos, ocorre para diferenças nos coeficientes de acomodação das duas superfícies, maiores ou iguais a 0.5, o que para valores de  $Kn$  baixos pode acarretar na formação de vórtices na parede com maior valor de  $\sigma$ , devido a uma queda na tensão de cisalhamento. A direção do feixe livre na entrada do microcanal não afeta significativamente o perfil dos campos analisados. Ao aumentar-se o valor de  $\sigma_{up}$  nos casos com baixos  $Kn$  as regiões de picos de pressão e energia da parede inferior deslocam-se à montante ao escoamento. O valor de  $Kn$  não interfere no comportamento (perfil) das curvas, referentes às superfícies, avaliadas neste trabalho, mas apenas em suas magnitudes. Além disso, o fluxo de calor trocado com a superfície é maior na entrada do microcanal e inversamente proporcional ao número de Knudsen.

A turbulência envolvida nesses escoamentos é tão pequena que apesar de em alguns casos os coeficientes de correlação estarem próximos de 1 (um), não é suficiente para afetar as características do escoamento.

Como proposta para trabalhos futuros, sugere a execução de simulações semelhantes à do presente trabalho, porém que contemplem a união de microcanais com diferentes coeficientes de acomodação, como, por exemplo, a união de nanotubos fabricados com diferentes materiais, visando estudar o impacto da descontinuidade na aderência das superfícies ao gás que escoava de um nanotubo para o outro. Assim o código existente escrito por Bird (1994) que simula campos axialmente simétricos, pode ser modificado, possibilitando esta avaliação.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AKTAS, O.; ALURU, N. R.; RAVAIOLI, U., Application of a parallel DSMC technique to predict flow characteristics in microfluidic filters, **J. MicroElectroMech. Syst.**, vol. 10, pp. 538-549, (2001).

BIRD, G. A., **Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows**, Oxford University Press, New York, 1994.

BIRD, G. A., Recent advances and current challenges for DSMC, **Computers and Mathematics with Applications**, vol. 35, pp. 1-14, (1998).

JI, Y.; YUAN, K.; CHUNG, J. N., Numerical simulations of wall roughness on gaseous flow and heat transfer in a microchannel, **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 49, pp. 1329-1339, (2006).

KUO, K. K., **Principle of Combustion**, John Wiley and Sons Inc., New York, 1986.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M., **Mechanics**, Addison - Wesley Publishing Company, Inc., Massachusetts, 1960.

LE, M.; HASSAN, I., Simulation of heat transfer in high speed microflows, **Applied thermal Engineering**, vol. 26, pp. 2035-2044, (2006).

LEE, J. F.; SEARS, F. W.; TURCOTTE, D. L., **Statistical Thermodynamics**, Addison - Wesley Publishing Company Inc., Massachusetts, 1963.

LEECH, J. W., **Mecânica Analítica**, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1971.

LILLY, T. C.; DUCAN, J. A.; NOTHNAGEL, S. L.; GIMELSHEIN, S. F.; GIMELSHEIN, N. E.; KETSDEVER, A. D.; WYSONG, I. J., Numerical and experimental investigation of microchannel flows with rough surfaces, **Physics of Fluids**, vol. 19, pp. 106101, (2007).

LIOU, W. W.; FANG, Y., Heat transfer in microchannel devices using DSMC, **J. MicroElectroMech. Syst.**, vol. 10, pp. 274-279, (2001).

LIOU, W. W.; FANG, Y., Forced Couette flow simulations using direct simulation Monte Carlo method, **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 4211-4220, (2006).

MUNSON, B. R.; YOUNG, D. F.; OKISHI, T. H., **Fundamentos da Mecânica dos Fluidos**, Edgar Blücher, 4° Ed., São Paulo, 2004.

PARK, J. H.; BAEK, S. W., Investigation of influence of thermal accommodation on oscillating micro-flow, **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 47, pp. 1313-1323, (2004).

SCHLICHTING, H., **Boundary - Layer Theory**, McGraw Hill, New York, 1960.

STEFANOV, S. K.; BOYD, I. D.; CAI, C., Monte Carlo analysis of macroscopic fluctuations in a hypersonic flow around a cylinder, **Physics of Fluids**, vol. 12, pp. 1226-1239, (2000).

VICENT, W. G.; KRUGER, C. H., **Introduction to Physical Gas Dynamics**, Robert E. Krieger Publishing Company, New York, 1965.

WANG, M.; LI, Z., Simulations for gas flows in microgeometries using the direct simulation Monte Carlo method, **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 25, pp. 975-985, (2004).

WANG, M.; LI, Z., Gas mixing in microchannels using the direct simulation Monte Carlo method, **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 49, pp. 1696-1702, (2006).

GOOGLE, pesquisa de imagens. Disponível em:  
<http://images.google.com.br/images?hl=pt-BR&q=cfd%2C+3d-grid&btnG=Pesquisar+imagens&gbv=2>  
Acesso em: 20 junho 2008, 15:00.