Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Influência da Interação Gás-Superfície na Probabilidade de Transmissão de Gases Através de Dutos Cônicos e Esféricos

Yan B. Barreto[1]
Felix Sharipov[2]
Departamento de Física, UFPR, Curitiba, PR

Ao modelar-se um gás rarefeito, geralmente assume-se que tal gás interage difusamente com superfícies. Em sentido contrário, alguns trabalhos experimentais [1, 2] apontam significativo desvio da interação difusa. Por outro lado, o modelo de Cercignani-Lampis (CL) descreve mais adequadamente a interação de um gás com superfícies; tal modelo contêm dois parâmetros: Coeficiente de acomodação (CA) tangencial α_t e CA normal α_n. Agora, uma vez que dificilmente conhecem-se os valores de tais coeficientes para uma determinada superfície, torna-se importante estimar sua influência em escoamentos de gases.

Objetiva-se aqui calcular a probabilidade de transmissão (PT) através de dutos cônicos e esféricos, baseando-se no modelo de CL e utilizando coeficientes de acomodação extraídos de dados experimentais [3]. Tais cálculos são feitos em termos da velocidade molecular adimensional $\boldsymbol{c} = (m/2k_{\mathrm{B}}T_0)^{1/2}\boldsymbol{v}$, onde m é a massa molecular do gás, k_{B} a constante de Boltzmann, T_0 a temperatura do gás, $\boldsymbol{v}$ a velocidade molecular dimensional. Ademais, pode-se escrever a lei de interação gás-superfície em uma forma geral — valendo-se do chamado núcleo de espalhamento $R(\boldsymbol{c}', \boldsymbol{c})$ — como $c_n f(\boldsymbol{c}) = -\int_{c'_n<0} c_n f(\boldsymbol{c}') R(\boldsymbol{c}', \boldsymbol{c}) \mathrm{d}\boldsymbol{c}'$, onde $f(\boldsymbol{c})$ é a função de distribuição de velocidades, $\boldsymbol{c}'$ e $\boldsymbol{c}$ são as velocidades moleculares das partículas incidente e refletida, respectivamente.

O núcleo de espalhamento $R(\boldsymbol{c}', \boldsymbol{c})$ representa a distribuição da velocidade $\boldsymbol{c}$ das partículas refletidas tendo sua velocidade incidente igual a $\boldsymbol{c}'$; pode-se decompor tal núcleo em núcleos para cada componente da velocidade, i.e. $R(\boldsymbol{c}', \boldsymbol{c}) = R_n(c'_n, c_n)R_t(c'_{t1}, c_{t1})R_t(c'_{t2}, c_{t2})$, onde c_n é a componente normal à superfície, c_{t1} e c_{t2} são duas componentes tangenciais. Assim, se a temperatura da superfície é igual a T_0, representa-se o núcleo de espalhamento de CL pelas seguintes componentes

$$R_n(c'_n, c_n) = \frac{c_n}{\pi\alpha_n} \int_0^{2\pi} \exp\left[-\left(c_n^2 + (1-\alpha_n)c_n'^2 + 2\sqrt{1-\alpha_n}c_n c'_n \cos\theta\right)/\alpha_n\right] \mathrm{d}\theta, \qquad (1)$$

$$R_t(c'_t, c_t) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha_t(2-\alpha_t)}} \exp\left[-\frac{(c_t - (1-\alpha_t)c'_t)^2}{\alpha_t(2-\alpha_t)}\right]. \qquad (2)$$

[1]ybb13@inf.ufpr.br
[2]sharipov@fisica.ufpr.br

A PT é calculada pelo método da partícula teste de Monte Carlo; tal método expõe-se no livro de Bird [4] (1976) levando em conta a interação difusa, e as modificações que abarcam o modelo de CL em tal método fazem-se no trabalho de Lord [5] (1991). Em suma, para gerar as componentes tangenciais c_{t1} e c_{t2}, geram-se duas variáveis c_* e θ como

$$c_* = \sqrt{-\log R_f}, \quad \theta = 2\pi R'_f, \tag{3}$$

onde R_f e R'_f são dois números aleatórios diferentes variando de 0 a 1; então, calculam-se as componentes tangenciais da velocidade c_{t1} e c_{t2} após a colisão com a superfície através das componentes correspondentes c'_{t1} e c'_{t2} antes da colisão como

$$c_{t1} = \sqrt{\alpha_t(2-\alpha_t)}c_* \cos\theta + (1-\alpha_t)c'_{t1}, \tag{4}$$

$$c_{t2} = \sqrt{\alpha_t(2-\alpha_t)}c_* \,\mathrm{sen}\theta + (1-\alpha_t)c'_{t2}. \tag{5}$$

Agora, para gerar a componente normal c_n, geram-se as variáveis c_* e θ consoante a equação 3 usando novos números aleatórios R_f e R'_f; então, a componente normal da velocidade c_n após a colisão com a superfície relaciona-se com a componente normal da velocidade c'_n antes da colisão como

$$c_n = \left[\alpha_n c_*^2 + (1-\alpha_n)c_n'^2 + 2\sqrt{\alpha_n(1-\alpha_n)}c_* c'_n \cos\theta\right]^{1/2}. \tag{6}$$

Por fim, neste trabalho, feito tais cálculos, mostrou-se que a influência do coeficiente de acomodação na probabilidade de transmissão depende do formato do duto; por exemplo, o coeficiente de acomodação de energia fracamente afeta a probabilidade de transmissão através de um duto cilíndrico, enquanto que sua influência é significante no caso de um duto cônico. Como era esperado, a probabilidade de transmissão aumenta quando o coeficiente de acomodação de momento diminui, porém, surpreendentemente, uma diminuição do coeficiente de acomodação de energia leva a uma probabilidade de transmissão menor.

Referências

[1] B. T. Porodnov, A. N. Kulev, and F. T. Tukhvetov. Thermal transpiration in a circular capillary with a small temperature difference. *J. Fluid Mech.*, 88(4):609–622, 1978.

[2] B. T. Porodnov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, and V. D. Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J. Fluid Mech.*, 64(3):417–437, 1974.

[3] F. Sharipov. Application of the Cercignani-Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. II. Slip and jump coefficients. *Eur. J. Mech. B / Fluids*, 22:133–143, 2003.

[4] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press, Oxford, 1976.

[5] R. G. Lord. Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel. *Phys. Fluids A*, 3(4):706–710, 1991.