



INPE-16614-TDI/1592

SIMULAÇÃO DIRETA MOLECULAR DA INFLUÊNCIA DE DEGRAUS NA SUPERFÍCIE DE VEÍCULOS DE REENTRADA

Paulo Henrique Mineiro Leite

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelo Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos, aprovada em 18 de setembro de 2009.

> Registro do documento original: <http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m18@80/2009/08.27.17.55>

> > INPE São José dos Campos 2009

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE Gabinete do Diretor (GB) Serviço de Informação e Documentação (SID) Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970 São José dos Campos - SP - Brasil Tel.:(012) 3945-6911/6923 Fax: (012) 3945-6919 E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO:

Presidente:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT) Membros:

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho - Centro de Tecnologias Especiais (CTE) Dr^a Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA) Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID) Dr. Ralf Gielow - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT) Dr. Wilson Yamaguti - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE) **BIBLIOTECA DIGITAL:**

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT) Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID) Jefferson Andrade Ancelmo - Serviço de Informação e Documentação (SID) Simone A. Del-Ducca Barbedo - Serviço de Informação e Documentação (SID) **REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID) Marilúcia Santos Melo Cid - Serviço de Informação e Documentação (SID) Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID) EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Viveca Sant'Ana Lemos - Serviço de Informação e Documentação (SID)





INPE-16614-TDI/1592

SIMULAÇÃO DIRETA MOLECULAR DA INFLUÊNCIA DE DEGRAUS NA SUPERFÍCIE DE VEÍCULOS DE REENTRADA

Paulo Henrique Mineiro Leite

Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia Espaciais/Combustão e Propulsão, orientada pelo Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos, aprovada em 18 de setembro de 2009.

> Registro do documento original: <http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m18@80/2009/08.27.17.55>

> > INPE São José dos Campos 2009

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Leite, Paulo Henrique Mineiro.

L536s

Simulação direta molecular da influência de degraus na superfície de veículos de reentrada / Paulo Henrique Mineiro Leite. – São José dos Campos : INPE, 2009. 164 p. ; (INPE-16614-TDI/1592)

Dissertação (Mestrado em Combustão e Propulsão) – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2009. Orientador : Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos..

1. Simulação direta de Monte Carlo. 2. Escoamento hipersônico. 3. Escoamento rarefeito. 4. Influência de degraus. 5. Veículo de reentrada. I.Título.

CDU 629.7:533.69.046

Copyright © 2009 do MCT/INPE. Nenhuma parte desta publicação pode ser reproduzida, armazenada em um sistema de recuperação, ou transmitida sob qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico, mecânico, fotográfico, reprográfico, de microfilmagem ou outros, sem a permissão escrita do INPE, com exceção de qualquer material fornecido especificamente com o propósito de ser entrado e executado num sistema computacional, para o uso exclusivo do leitor da obra.

Copyright © 2009 by MCT/INPE. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, microfilming, or otherwise, without written permission from INPE, with the exception of any material supplied specifically for the purpose of being entered and executed on a computer system, for exclusive use of the reader of the work.

Aprovado (a) pela Banca Examinadora em cumprimento ao requisito exigido para obtenção do Título de Mestre em

Engenharia e Tecnologia Espaciale/Combustão e Propulsão

Dr. Wilson Fernando Nogueira dos Santos

Presidente / Orientador(a) / INPE / Cachoeira Paulista - SP

Dr. Jerônimo dos Santos Travelho

mbro da Banca / INPE / São José dos Campos - SP

Dr. José Bezerra Pessoa Filho

N BIZIMA PARA FALHO. Indo(a) IEAWCTA / São José dos Campos - SP

Aluno (a): Paulo Henrique Mineiro Leite

São José dos Campos, 18 de setembro de 2009 -

Dedico este trabalho a meus Pais, José Silvio e Nair, que tanto me incentivaram a conclusão desta pesquisa.

A meus pais ...

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus.

A meus pais José Silvio e Nair por sempre estarem ao meu lado me apoiando em minhas decisões.

A minha filha Helena.

A minha noiva Karina, que soube abdicar de momentos de lazer face às dificuldades da pesquisa diuturna.

Aos professores da pós-graduação do INPE, em especial ao meu orientador, Dr. Wilson Santos, que soube com paciência ao longo deste anos, me passar todos os conhecimentos necessários a execução deste trabalho.

Aos amigos que nos momentos difíceis, sempre me deram força, em especial aos amigos Débora de Oliveira Silva, Lúcio Américo de Oliveira Rosa e Mauro Figueiredo Crespo.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-CNPq pelo apoio financeiro.

A todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

No projeto de veículos hipersônicos, o conhecimento dos fatores que afetam as cargas térmicas e aerodinâmicas que agem na superfície do veículo se torna imperativo. Usualmente, no cálculo das cargas térmicas, a análise assume que o veículo possui um contorno livre de imperfeições. No entanto, descontinuidades estão presentes na superfície de veículos na reentrada visando atender diferentes propósitos. Neste cenário, um estudo numérico é realizado com o propósito de examinar o impacto de degraus com faces a montante e a jusante na estrutura do escoamento e nas propriedades aerodinâmicas na superfície de veículos na reentrada, sob condições de escoamento hipersônico rarefeito. Os cálculos foram realizados com um código computacional robusto que leva em conta os efeitos de não-equilíbrio, e que tem apresentado excelentes resultados quando comparados com dados de testes em vôo e de testes em laboratório. Uma descrição detalhada do impacto nas propriedades do escoamento – velocidade, massa específica, pressão e temperatura – bem como nas propriedades aerodinâmicas na superfície – fluxo de moléculas, transferência de calor, pressão e atrito – é apresentada separadamente para seções a montante, nas vizinhanças e a jusante dos degraus, devido as variações na altura da face. A análise mostrou que o degrau com face a montante afetou o escoamento bem a montante. onde o domínio deste efeito aumentou com o aumento da altura da face do degrau. A análise mostrou, também, que a região de recirculação nas vizinhanças do degrau com face a montante afetou as propriedades aerodinâmicas não somente na superfície a montante do degrau mas também na face frontal. Para o caso de um degrau com face a jusante, nenhum efeito a montante foi observado ao longo superfície superior. Todavia, devido a separação do escoamento na quina do degrau, uma região de recirculação se formou atrás da face do degrau. Como resultado, as propriedades do escoamento e as propriedades aerodinâmicas na superfície foram afetadas.

DIRECT MOLECULAR SIMULATION OF STEP INFLUENCE ON A REENTRY VEHICLE SURFACE

ABSTRACT

In the design of a hypersonic vehicle, the knowledge of the factors that affect the thermal and aerodynamic loads acting on the vehicle surface becomes imperative. Usually, in the calculations of the thermal load, the analysis assumes that the vehicle has a smooth surface. However, discontinuities, such as steps, are present on reentry vehicle surfaces for different purposes. In this scenario, a numerical study is performed in order to examine the impact of forward-facing and backward-facing steps on the flowfield structure and on the aerodynamic surface quantities for a reentry vehicle at rarefied hypersonic flow conditions. The calculations are performed with a detailed computer code that properly accounts for non-equilibrium effects and that has been demonstrated to yield excellent comparisons with flight- and ground-test data. A very detailed description of the impact on the flow properties velocity, density, pressure, and temperature - as well as on the aerodynamic surface properties - number flux, heat transfer, pressure, and skin friction - has been presented separately upstream, at the vicinity, and downstream of the forward-facing and backward-facing steps due to changes on their face height. The analysis showed that the forward-facing step disturbed the flowfield far upstream, where the domain of influence increased with the face-height rise. It was found that the recirculation region at the vicinity of the forward-facing step affected the aerodynamic surface properties not only on the surface upstream the step but also on the frontal face of the step. For the backward-facing step case, no upstream disturbances were observed along the surface. Nevertheless, due to the separation flow at the corner of the step, a recirculation region was formed behind the rear face. As a result, the flowfield properties and the aerodynamic surface properties were affected.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

1 INTRODUÇÃO	25
1.1 Motivação	. 25
1.2 Regimes de Escoamentos na Reentrada	. 26
1.3 Contribuições Anteriores	. 28
1.4 Objetivos e Escopo do Presente Trabalho	. 31
2 MÉTODOS COMPUTACIONAIS	33
2.1 Métodos para Escoamentos no Regime de Transição	. 33
2.2 Método de Simulação Direta de Monte Carlo - (DSMC)	. 37
2.2.1 Metodologia DSMC	. 39
2.2.2 Modelo Molecular	. 42
2.2.3 Modelo Colisional	. 46
2.2.4 Colisões Binárias Elásticas	. 49
2.2.4.1 Velocidade Relativa	. 49
2.2.4.2 Seção de Choque	. 52
2.2.5 Graus Internos de Liberdade	. 52
2.2.6 Implementação das Condições de Contorno	. 55
3 PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL	57
3.1 Definição da Geometria	. 57
3.2 Condições da Simulação Numérica	. 58
3.3 Condições do Escoamento e Meio Não-Perturbado	. 61
4 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO	63
4.1 Requisitos Computacionais	. 63
4.2 Geração da Malha Computacional	. 66
4.3 Adaptação da Malha Computacional	. 66
4.4 Caso Teste	. 66

4.4.1 Efeito da Resolução da Malha Computacional
4.4.2 Efeito da Variação do Número de Moléculas
4.4.3 Efeito da Condição de Contorno a Jusante
4.4.4 Comparação com Experimental e Numérico
4.5 Caso Degrau com face a Montante
5 RESULTADOS COMPUTACIONAIS
5.1 Estruturas do Escoamento
5.1.1 Degrau com face a Montante
5.1.1.1 Campo de Velocidade
5.1.1.2 Campo de Massa Específica
5.1.1.3 Campo de Pressão
5.1.1.4 Campo de Temperatura
5.1.2 Degrau com face a Jusante
5.1.2.1 Campo de Velocidade
5.1.2.2 Campo de Massa Específica
5.1.2.3 Campo de Pressão
5.1.2.4 Campo de Temperatura
5.2 Propriedades Aerodinâmicas na Superfície
5.2.1 Degrau com face a montante
5.2.1.1 Fluxo de Moléculas
5.2.1.2 Coeficiente de Transferência de Calor
5.2.1.3 Coeficiente de Pressão
5.2.1.4 Coeficiente de Atrito $\dots \dots \dots$
5.2.2 Para os casos com face a jusante $\dots \dots \dots$
5.2.2.1 Fluxo de Moléculas
5.2.2.2 Coeficiente de Transferência de Calor
5.2.2.3 Coeficiente de Pressão
5.2.2.4 Coeficiente de Atrito
6 CONCLUSÕES
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

LISTA DE FIGURAS

$1.1 \\ 1.2 \\ 1.3$	Nariz do veículo x-38	26 28 31
2.1	Faixas de aplicabilidade dos modelos matemáticos convencionais em fun- ção do número de Knudsem local	34
2.2 2.3 2.4	colisão binária do esquema de referência no centro de massa	40 51 56
$3.1 \\ 3.2$	Degrau com face a montante e a jusante	57 61
4.1	Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada x nos coeficientes de (a) atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor	70
4.2	Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada y nos coeficientes de (a) atrito. (b) pressão e (c) transferência de calor	71
4.3	Efeito da alteração do número de moléculas, nos coeficientes de (a) atrito,	70
4.4	Efeito da variação do comprimento da placa plana nos coeficientes de (a)	12
4.5	atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor	73
4.6	tais e numéricos	76
	longo da placa plana. Linha cheia representa a presente simulação, e sím- bolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais	
4.7	e numéricos	77
	bolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos	78

4.8	Perfis de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície da placa plana para $y = 1,25$ mm. Linha cheia representa a presente simulação, e sím- bolos cheios e vazios representam respectivamente dados experimentais	
	e numéricos.	79
4.9	Perfis de velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície da placa plana para $y = 1,25$ mm. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimen-	
4.10	tais e numéricos	80
	méricos.	80
4.11	Malha computacional padrão para o degrau com face a montante com \boldsymbol{h}	
4.12	= 3 mm.	82
4.13	coencientes de atrito (acima), pressao (meio) e transferencia de calor (abaixo) para degrau com face a montante com $h = 3 \text{ mm.} \dots$. Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada y nos	83
4.14	coeficientes de atrito (acima), pressão (meio) e transferência de calor (abaixo) para degrau com face a montante com $h = 3 \text{ mm.} \dots \dots$. Efeito da variação do número de moléculas nos coeficientes de atrito (acima), pressão (meio) e transferência de calor (abaixo) para degrau	84
	com face a montante com $h = 3$ mm	85
$5.1 \\ 5.2$	Comportamento da camada limite ao longo da placa plana Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície in-	88
5.3	ferior do degrau com face a montante como função da altura h . Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície su-	91
	perior do degrau com face a montante como função da altura $h.$ \ldots .	92
5.4	Distribuição de linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus com altura	
5.5	<i>h</i> de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior) Distribuição da intensidade do vetor velocidade (\vec{V} /U_{∞}) nas vizinhan- cas do degrau com altura <i>h</i> de 3 mm (superior) 6 mm (meio) e 9 mm	93
	(inferior).	95
5.6	Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície inferior	
	do degrau com face a montante como função da altura h	98

5.7	Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície superior	
	do degrau com face a montante como função da altura h	99
5.8	Efeito a montante da influência do degrau na distribuição de massa es-	
	pecífica ρ adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada x nor-	
	malizada por λ_{∞} e (b) por <i>h</i> .	101
5.9	Distribuição da massa específica (ρ/ρ_{∞}) nas vizinhancas do degrau com	
	altura h de 3 mm (superior) , 6 mm (meio) e 9 mm (inferior),	102
5.10	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau	
	com face a montante como funcão da altura h .	104
5.11	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau	
	com face a montante como funcão da altura h .	106
5.12	Efeito a montante da influência do degrau na distribuição de pressão p	
	adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada x normalizada por	
	λ_{∞} e (b) por <i>h</i>	107
5.13	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura h	
	de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior)	108
5.14	Distribuição de temperaturas (T/T_{∞}) para duas seções ao longo da su-	
	perfície inferior do degrau com face a montante como função da altura	
	h	111
5.15	Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície infe-	
	rior do degrau com face a montante como função da altura h	112
5.16	Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície su-	
	perior do degrau com face a montante como função da altura h	113
5.17	Efeito a montante da influência do degrau na distribuição da temperatura	
	de translação T_T adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada	
	x normalizada por λ_{∞} e (b) por h	115
5.18	Distribuição da temperatura global (T_G/T_∞) nas vizinhanças do degrau	
	com altura h de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior)	116
5.19	Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície su-	
	perior do degrau com face a jusante como função da altura h	118
5.20	Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície in-	
	ferior do degrau com face a jusante como função da altura $h.$	119
5.21	Distribuição de linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus com altura	
	h de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo)	120
5.22	Distribuição da intensidade do vetor velocidade (\vec{V} /U_{∞}) nas vizinhan-	
	ças do degrau com altura h de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm	
	(abaixo)	122

5.23	Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície superior
	do degrau com face a jusante como função da altura $h.$
5.24	Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície inferior
	do degrau com face a jusante como função da altura h
5.25	Distribuição da massa específica (ρ/ρ_{∞}) nas vizinhanças do degrau com
	altura h de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo)
5.26	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau
	com face a jusante como função da altura h
5.27	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau
	com face a jusante como função da altura h
5.28	Distribuição de pressão (p/p_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura h
	de 3 mm (acima) , 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo), $\dots \dots \dots$
5.29	Distribuição de temperaturas (T/T_{∞}) para duas seções ao longo da su-
0.20	perfície superior do degrau com face a jusante como função da altura
	h
5 30	Distribuição de temperaturas $(T/T_{\rm er})$ para duas seções ao longo da su-
0.00	perfície inferior do degrau a jusante como função da altura h 132
5 31	Distribuição de temperatura global (T_C/T_{-}) ao longo da superfície su-
0.01	porior de degrau a jusante como função da altura h 133
5 39	Distribuição de temporatura global (T_{α}/T_{α}) ao longo de superfício infe
0.02	Distribuição de temperatura globar (I_G/I_{∞}) ao longo da superincie inte-
5 22	Distribuição de temporature global (T_{π}/T_{π}) pas viginhances de degrau
0.00	Distribuição da temperatura giobar (I_G/I_{∞}) has vizimanças do degrau
5 24	Distribuição do fluxo do moléculos (N_{i}) para os superfícios (a) inferior o
0.34	Distribuição do nuxo de moleculas (N_f) para as supernicies (a) interior e
F 9F	superior e para a (b) face do degrau a montante como função da altura n . 137
0.30	Distribuição do coenciente de transferência de calor (C_h) para as super-
	ficies (a) inferior e superior e para a (b) face do degrau a montante como $f_{ab} = \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2}}$
F 90	$funçao da altura h. \dots 139$
5.36	Distribuição do coeficiente de transferencia de calor incidente, refletido e
	total ao longo da superfície inferior do degrau com altura h de (a) 3 mm,
	(b) 6 mm e (c) 9 mm
5.37	Contribuição das energias de translação, rotação e vibração para o coe-
	ficiente de transferência de calor incidente ao longo da superfície inferior
	do degrau com altura h de (a) 3 mm, (b) 6 mm e (c) 9 mm 142
5.38	Distribuição do coeficiente de pressão (C_p) para as superfícies (a) inferior
	e superior e para a (b) face do degrau a montante como função da altura $h.144$

5.39	Distribuição da razão de pressão (p_w/p_∞) agindo na superfícies (a) infe-	
	rior e superior e na (b) face do degrau com face a montante com $h = 3$	
	mm	145
5.40	Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) para as superfícies (a) inferior	
	e superior e para a (b) face do degrau com face a montante como função	
	da altura h	147
5.41	Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) nas vizinhanças da face do	
	degrau em função da altura h	148
5.42	Distribuição das linhas de corrente nas vizinhanças da base dos degraus	
	com altura h de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior)	149
5.43	Distribuição do fluxo de moléculas (N_f) para as superfícies (a) superior	
	e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da	
	altura <i>h</i>	151
5.44	Distribuição do coeficiente de transferência de calor (C_h) para as superfí-	
	cies (a) superior e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante	
	como função da altura <i>h</i>	152
5.45	Distribuição do coeficiente de pressão (C_p) para as superfícies (a) superior	
	e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da	
	altura <i>h</i>	153
5.46	Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) para as superfícies (a) superior	
	e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da	
	altura <i>h</i>	154

LISTA DE TABELAS

Pág.	,
------	---

3.1 3.2 3.3	Características geométricas dos degraus
4.1	Principais propriedades do meio não-perturbado
5.1	Ponto de separação e aderência do escoamento
5.2	Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a massa
	específica
5.3	Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a pressão. 107
5.4	Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a tempe-
	ratura de translação

LISTA DE SÍMBOLOS

С	Vetor da velocidade molecular, m/s
С	Módulo da velocidade molecular , m/s
c_0	Vetor da velocidade macroscópica, m/s
c_m	Módulo da velocidade do centro de massa de duas moléculas, m/s
C_f	Coeficiente de atrito
C_h	Coeficiente de tranferência de calor
C_p	Coeficiente de pressão
d	Diâmetro da esfera rígida
е	Fluxo de energia, J/kg
F_N	Número de moléculas reais, representada por uma única molécula simulada
Κ	Constante de Boltzmann
Kn	Número de Knudsem λ/l
L	Comprimento característico do corpo, m
m	Massa molecular ,kg
m_r	Massa reduzida
N_{coll}	Número de colisões
N_f	Número admensional de Fluxo
n_p	Concentração molecular da espécie p , $\rm m^{-3}$
р	Pressão escalar, N/m^2
q	Fluxo de calor líquido, W/m^2
R	Constante universal dos gases
Т	Temperatura, K
U	Componente da velocidade do meio não-perturbado na direção
	coordenada x, m/s
u	Componente da velocidade molecular na direção coordenada x, m/s
V_c	Volume da célula
v	Componente de velocidade molecular na direção coordenada y, m/s
X	Comprimento admensional, x/λ_{∞}
Y	Altura admensional, y/λ_{∞}
x, y	Eixos cartesianos no espaço físico
Ζ	Número de relaxação

Símbolos Gregos

λ Livre caminho médio Fluxo de moléculas no domínio ϕ Seção de choque colisional σ Seção de choque colisional média $\bar{\sigma}$ Seção de choque colisional total σ_T Expoente da lei de força intermolecular η Coeficiente de viscosidade, Ns/m^2 μ Massa específica do gás, kg/m^3 ρ Δt Passo no tempo, s Tempo de relaxação τ Tempo colisional médio au_c Graus de liberdade ζ $\bar{\zeta}$ Média dos graus de liberdade Razão de calor específico γ

Subscritos

- *i* Refere-se a incidente
- G Refere-se a global
- R Refere-se a rotacional
- r Refere-se a refletida
- *ref* Propriedade de referência
- T Refere-se a translacional
- V Refere-se a vibracional
- w Refere-se as condições na parede
- ∞ Refere-se as condições do meio não-perturbado

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

No projeto e desenvolvimento de veículos hipersônicos, o conhecimento dos fatores que afetam as cargas térmicas e mecânicas agindo sobre os veículos é de primordial importância. Normalmente, no cálculo das cargas térmicas, a análise assume que o veículo possui uma superfície lisa livre de imperfeições. Todavia, descontinuidades - filetes, cavidades ou degraus - estão presentes na superfície de veículos aeroespaciais devido, entre outros fatores, a tolerância de fabricação, instalação de sensores, espaçamento entre as placas de proteção térmica em razão das diferenças na taxa de expansão ou ablação em função do uso de diferentes materiais (BERTRAM et al., 1967; BERTRAM; WIGGS, 1963; HAHN, 1969; JAKUBOWSKI; LEWIS, 1973; MORGENS-TERN JR; CHOKANI, 1994; NESTLER et al., 1969; NESTLER, 1982). Dentre os veículos aeroespaciais (EVERHART et al., 2006; GROTOWSKY; BALLMANN, 2000; HINDERSKS; RADESPIED, 2006) encontram-se os veículos hipersônicos utilizados na reentrada da atmosfera terrestre. Tais descontinuidades na superfície de veículos hipersônicos constituem uma fonte potencial no aumento do fluxo de calor para a superfície ou até mesmo uma transição prematura no regime do escoamento, i.e., de laminar para turbulento.

O escoamento no interior de filetes e cavidades ou ao redor de degraus pode se tornar complexo devido a gradientes de pressão (EVERHART et al., 2006) e a interação com a estrutura (HINDERSKS; RADESPIED, 2006), entre outros aspectos. Outrossim, a configuração do escoamento pode se tornar ainda mais complexa se a estrutura do veículo é deformada por cargas térmicas ou mecânicas. Tais cargas podem causar significantes mudanças nas dimensões dos filetes, cavidades ou degraus entre as placas de proteção térmicas colocadas na superfície do veículo. Conseqüentemente, tais modificações na geometria nominal do veículo podem conduzir ao aparecimento de pontos de estagnação, pontos quentes, separação do escoamento ou afetar a transição na camada limite.

O sistema de proteção térmica de veículos na reentrada, como por exemplo, ônibus espaciais ou o veículo X-38 (Figura 1.1), exige filetes entre os elementos de proteção de modo a compensar a expansão térmica do material. Neste contexto, torna-se necessário um prognóstico detalhado das condições do escoamento e das cargas térmicas de modo que a presença de filetes, cavidades ou degraus no sistema de proteção sejam bem projetados.



Figura 1.1 - Nariz do veículo x-38.

De acordo com o comitê de investigação do acidente com o ônibus espacial Columbia (Columbia Accident Investigation Board-CAIB) (EVERHART et al., 2006), a provável causa que resultou na perda do veículo espacial, durante o vôo STS-107 em fevereiro de 2003, foi a presença de um filete no sistema de proteção térmica no bordo de ataque da asa esquerda, originado de um pedaço do material de isolamento.

Os exemplos citados enfatizam a importância do escoamento através de descontinuidades – filetes, cavidades ou degraus – e indicam que uma investigação precisa nas cargas aerotermodinâmicas se torna necessária no projeto de veículos na reentrada.

1.2 Regimes de Escoamentos na Reentrada

Veículos espaciais reentrando na atmosfera terrestre passam por diferentes regimes de velocidade e condições de vôo. Importantes interações físicas surgem entre o veículo e o ar ambiente ao redor do veículo. Em grandes altitudes, a interação entre o veículo e o ar atmosférico é caracterizada pelo regime molecular livre de colisões. Nesse regime, as moléculas do ambiente colidem com a superfície do veículo, interagem com a superfície e, em seguida, são refletidas da superfície. Outrossim, colisões entre as moléculas refletidas com aquelas do meio não-perturbado (ambiente) são improváveis de ocorrer. Portanto, nesse regime molecular tais colisões são ignoradas. Quando o veículo penetra um pouco mais na atmosfera em direção a superfície terrestre, o livre caminho médio entre as moléculas do meio não-perturbado diminui, e as colisões entre as moléculas refletidas da superfície do veículo com aquelas do meio não-perturbado não podem mais ser ignoradas. Como resultado, escoamento nessa condição define o regime de transição, i.e., transição entre o escoamento no regime livre de colisões e o escoamento no regime do contínuo. No regime de transição, a contribuição das forças aerodinâmicas e do fluxo de calor para a superfície do veículo aumenta rapidamente com a diminuição da altitude e causa grandes mudanças nas características aerodinâmicas do veículo quando comparadas com aquelas no regime do contínuo. A medida que o veículo penetra ainda mais na atmosfera terrestre, atinge-se o regime do contínuo. Neste regime, o escoamento ao redor do veículo é tratado por um modelo macroscópico que considera o ar como um meio contínuo, e a descrição do escoamento é feita em termos de variações espacial e temporal das propriedades primárias, tais como velocidade, pressão, massa específica e temperatura.

O critério básico que determina o regime do escoamento – livre de colisões, transição ou contínuo – é dado pelo número de Knudsen definido por,

$$Kn = \frac{\lambda}{l} \tag{1.1}$$

onde λ , é o livre caminho médio percorrido pelas moléculas entre colisões e l é um comprimento característico do corpo.

Um escoamento é definido no regime do contínuo quando o número de Knudsen tende a zero. Por outro lado, um escoamento está no regime livre de colisões quando o número de Knudsen tende a infinito. A Figura 1.2 apresenta a classificação dos regimes de escoamento em função do número de Knudsen local.

Para escoamentos ao redor de veículos na reentrada, na faixa de 120 km a 60 km de altitude, o livre caminho médio das moléculas, λ , pode ser da ordem da profundidade h ou da largura l das imperfeições. Em tais situações, o número de Knudsen, que indica o grau de rarefação do escoamento, pode estar no regime de transição, i.e., entre o regime do contínuo e o regime livre de colisões. As dimensões das imperfeições na superfície, profundidade h ou largura l para filetes ou cavidades, ou altura h para degraus, são geralmente da ordem de 3 a 6 mm (EVERHART et al., 2006; GAI; MILTHORPE, 1995; HOZUMI et al., 2004; HINDERSKS; RADESPIED, 2006; JACKSON et al., 2001) em função das diversas finalidades apontadas anteriormente. A título de



Figura 1.2 - Regimes de escoamento em função do número de Knudsen.

ilustração, para 90, 80, 70 e 60 km de altitude, o livre caminho médio das moléculas λ é de 26,03, 4,11, 0,929 e 0,265 mm, respectivamente. Como resultado, para h (ou l) de 3 mm, o número de Knudsen global é da ordem de 8,67, 1,37, 0,31 e 0,088, para altitudes de 90, 80, 70 e 60 km, respectivamente. Considerando-se h (ou l) de 6 mm, o número de Knudsen global mostrado é reduzido pela metade. Neste cenário, o número de Knudsen situa-se no regime de transição, normalmente definido pela faixa 0,1 < Kn < 10. No regime de transição, os conceitos da hipótese do contínuo não se aplicam e a estrutura molecular do gás deve ser considerada.

1.3 Contribuições Anteriores

Escoamentos sobre filetes, cavidades ou degraus, encontrados em muitas aplicações em engenharia, têm sido investigados por várias décadas. Na engenharia aeroespacial, filetes, cavidades ou degraus surgem como características de projeto em configurações aerodinâmicas modernas. Vários trabalhos experimentais e numéricos (BER-TRAM; WIGGS, 1963; BERTRAM et al., 1967; CAMUSSI et al., 2008; EVERHART et al., 2006; GAI; MILTHORPE, 1995; GROTOWSKY; BALLMANN, 2000; HAHN, 1969; HOZUMI et al., 2004; HINDERSKS; RADESPIED, 2006; JAKUBOWSKI; LEWIS, 1973; JACKSON et al., 2001; LEE; CHANDRA, 2006; MORGENSTERN JR; CHOKANI, 1994; NESTLER et al., 1969; NESTLER, 1982; D.I.PULLIN; J.K.HARVEY, 1977; ROM; SEGINER, 1964; RO-WLEY; WILLIAMS, 2006; SCHERBERG; SMITH, 1967; SHANKAR; DESHPANDE, 2000; ZDANSKI et al., 2004) foram realizados com o propósito de se investigar o impacto na estrutura do escoamento hipersônico sobre veículos aeroespaciais devido as imperfeições, distorções ou defeitos presentes na superfície de tais veículos. A título de ilustração, somente alguns desses trabalhos serão comentados a seguir. Bertram e Wiggs (BERTRAM; WIGGS, 1963) investigaram experimentalmente o efeito de distorções, consistindo de pequenas protuberâncias e buracos, na asa de um veículo hipersônico. O efeito das distorções na distribuição de pressão e fluxo de calor para a superfície foi investigado para números de Mach de 7 a 10 e ângulos de ataque até 20 graus. Os resultados mostraram que as distorções na superfície apresentaram uma menor influência na distribuição de pressão do que na distribuição do fluxo de calor. Os autores observaram, também, que todos os modelos de distorções investigados causaram, pelo menos, um aumento local no aquecimento aerodinâmico.

Rom e Seginer (ROM; SEGINER, 1964) estudaram a taxa de transferência de calor de um escoamento hipersônico na superfície inferior de um degrau com face a jusante. Os resultados das medidas indicaram que a distribuição da taxa de transferência de calor é dependente da espessura relativa da camada limite na separação do escoamento e da altura h do degrau.

Scherberg e Smith (SCHERBERG; SMITH, 1967) investigaram experimentalmente a influência do número de Mach e da altura h de um degrau com face a jusante na pressão exercida em sua superfície inferior. Os resultados apontaram que estas mudanças são funções lineares da pressão do meio não-perturbado e da altura do degrau.

Jakubowski e Lewis (JAKUBOWSKI; LEWIS, 1973) investigaram experimentalmente a distribuição do fluxo de calor e da pressão de um escoamento laminar supersônico sobre um degrau com face a jusante com/sem sucção de massa da região de separação. Em ambos os casos, com e sem sucção, um aumento na altura do degrau resultou em uma queda acentuada nas taxas de aquecimento para a base do degrau, as quais foram gradualmente recuperadas para próximas daquelas observadas em um escoamento sem separação obtidas em uma configuração de placa-plana. O estudo indicou, também, que a altura do degrau é fator determinante na taxa de aquecimento na base do degrau. Todavia, para seções mais afastadas a jusante do degrau, a taxa de aquecimento deixa de ser afetada pela altura do degrau e passa a ser influenciada pelas propriedades do escoamento principal externo ao degrau.

Pullin e Harvey (D.I.PULLIN; J.K.HARVEY, 1977) analisaram numericamente um escoamento hipersônico bidimensional ao redor de um degrau com face a montante. A análise apontou que para as vizinhanças da base do degrau, o escoamento sofreu uma rápida desaceleração e compressão, acompanhada de uma repentina transição para o equilíbrio termodinâmico. O estudo identificou, também, a existência de uma pequena região de separação em virtude de uma suposta recirculação próxima a base do degrau.

Escoamento hipersônico transiente sobre uma cavidade foi investigado numericamente por Morgenstern Jr. e Chokani (MORGENSTERN JR; CHOKANI, 1994). O objetivo do estudo era analisar os efeitos do número de Reynolds e da razão comprimentoprofundidade (L/H) da cavidade. A investigação mostrou o surgimento de um apreciável aumento na taxa de transferência de calor e variações na pressão estática no final da cavidade. Oscilações no escoamento foram observadas para escoamentos com altos números de Reynolds. Os resultados apontaram que as amplitudes dessas oscilações aumentavam com a razão L/H da cavidade.

Gai e Milthorpe (GAI; MILTHORPE, 1995) analisaram a transferência de calor em um escoamento hipersônico ao redor de um degrau com face a jusante. O estudo indicou que a distribuição de transferência de calor na parte a jusante do degrau é diretamente influenciada pela espessura relativa entre a camada limite na separação do escoamento e a altura h do degrau.

Grotowsky e Ballmann (GROTOWSKY; BALLMANN, 2000) examinaram o escoamento laminar hipersônico sobre degraus empregando Dinâmica de Fluído Computacional (CFD) e compararam com resultados experimentais. Degraus do tipo face a montante e a jusante na superfície de um veículo hipersônico genérico foram simulados em uma placa plana com número de Mach $M_{\infty} \sim 8$, número de Reynolds $Re_{\infty} \sim 10^8$ e altitude de 30 km. De acordo com os autores, os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância com os trabalhos experimentais disponíveis na literatura, contribuíram para um melhor entendimento dos fenômenos físicos presentes, além de forneceram valiosas informações para a construção de veículos hipersônicos.

Camussi et al. (CAMUSSI et al., 2008) analisaram as flutuações da pressão na parede e no campo de velocidades nas superfícies inferior e superior de um degrau com face a montante. As medidas foram conduzidas para diferentes números de Reynolds, Re_h , baseados na altura h do degrau para ambas as superfícies. Nesse estudo foi claramente identificada regiões de separação nas superfícies a montante e a jusante da face do degrau . Os autores observaram que as variações no Re_h afetou de forma significativa a intensidade e o tamanho da região de recirculação a jusante da face do degrau, ao passo que a região a montante permaneceu mais estável. O coeficiente de pressão apresentou um pico na região localizada a jusante da face do degrau, a uma distância de aproximadamente duas vezes a altura h do degrau. Essa posição coincidiu com a localização média do ponto de recolamento do escoamento. Esse comportamento, por sua vez, foi atribuído a rápida aceleração do escoamento ao passar pela quina do degrau.

De acordo com a literatura, a estrutura do escoamento sobre degraus pode ser esquematizado como ilustrado na Figura 1.3.



Figura 1.3 - Degraus com faces a montante e a jusante.

Estudos de vários aspectos relacionados com o escoamento ao redor de degraus com faces a montante ou a jusante são, em grande parte, focados nos casos onde a espessura da camada limite é menor do que a altura h do degrau. Situações onde a espessura da camada limite é maior do que a altura do degrau não têm sido exploradas.

1.4 Objetivos e Escopo do Presente Trabalho

O presente trabalho investiga o impacto de imperfeições, presentes na superfície de veículos hipersônicos, na estrutura do escoamento bem como nas propriedades aerodinâmicas na superfície de veículos na reentrada. Entende-se por estrutura do escoamento a distribuição das propriedades primárias, tais como velocidade, massa específica, pressão e temperatura, a montante do bordo de ataque do veículo bem como adjacente a superfície do veículo. Definem-se como propriedades aerodinâmicas na superfície o fluxo de calor e as forças normal e tangencial agindo na superfície em termos de coeficiente de transferência de calor, coeficiente de pressão, coeficiente de atrito e coeficiente de arrasto.

No presente trabalho, as imperfeições ou distorções na superfície serão modeladas por degraus com face a montante e a jusante. O conhecimento da estrutura do escoamento sobre degraus é importante no projeto aerotermodinâmico de configurações hipersônicas, incluindo-se, entre outros, aqueles relacionados com o controle térmico de superfícies e a possibilidade da aplicação de painéis de proteção térmica deslizantes na estrutura dos futuros veículos espaciais. Devido aos possíveis regimes de escoamentos associados com tais configurações, em função da fase de reentrada na atmosfera, podem surgir situações onde a espessura da camada limite se torna comparável ou maior do que a altura h do degrau. Como resultado, modificações e/ou complexidade na estrutura do escoamento poderão ocorrer, como por exemplo, a presença do degrau pode ser comunicada a montante através da porção subsônica da camada limite, os efeitos viscosos podem aumentar sua faixa de influência.

O material desta dissertação está organizado em mais seis capítulos. O Capítulo 2 apresenta uma descrição do método computacional apropriado para a solução do problema proposto. O Capítulo 3 descreve o procedimento computacional adotado. Esse capítulo inclui as condições de simulação, a geometria utilizada bem como os parâmetros geométricos importantes. O Capítulo 4 discute a verificação bem como a validação do código computacional utilizado. Os resultados computacionais e a discussão dos resultados são apresentados no Capítulo 5. Nesse capítulo, as principais características da estrutura do escoamento e das propriedades aerodinâmicas na superfície serão apresentadas e discutidas. Finalmente, o Capítulo 6 apresenta as conclusões desta dissertação e uma seção especial sobre trabalhos futuros.

2 MÉTODOS COMPUTACIONAIS

2.1 Métodos para Escoamentos no Regime de Transição

O estudo de fenômenos físicos em escoamentos hipersônicos tem sido um desafio que está diretamente relacionado com o desenvolvimento de novas tecnologias aeroespaciais. As dificuldades que surgem no estudo de tais escoamentos são causadas por problemas relacionados com os efeitos de gases a temperaturas elevadas, que influenciam fortemente as forças presentes no escoamento (pressão, tensão cisalhante), fluxo de energia (aquecimento radiativo e convectivo) e fluxo de massa (ablação). Estes problemas se tornam ainda mais complexos com a diminuição da massa específica do escoamento.

As dificuldades de dispositivos experimentais para escoamentos hipersônicos de alta entalpia e baixa massa específica, onde vários processos físicos e químicos são relevantes, têm estimulado o desenvolvimento de vários métodos numéricos de modo a simular esses escoamentos. Como resultado, existem atualmente vários métodos numéricos que são precisos e capazes de resolver problemas de escoamentos hipersônicos em meio rarefeito. A escolha do método apropriado dependerá do grau de rarefação do escoamento, do comprimento característico do problema e da presença dos efeitos de gases reais.

Escoamentos são caracterizados por uma variedade de quantidades admensionais. Para o propósito deste trabalho, o número de Reynolds, Re, o número de Mach, M, e o número de knudsen, Kn, são os mais importantes. O grau de rarefação de um escoamento é usualmente expresso através do número de Knudsen definido pela Equação 1.1. Considerando-se que o livre caminho médio λ é inversamente proporcional a massa específica do escoamento, então nota-se que não é somente a massa específica do escoamento, então nota-se que não é somente a massa específica do escoamento que determina o grau de rarefação, mas sim a razão desta propriedade com a dimensão característica do problema. A hipótese do contínuo é válida quando o número de Knudsen global tende a zero. Neste regime de escoamento, pode-se desconsiderar a estrutura microscópica e considerar somente as propriedades macroscópicas tais como a massa específica, velocidade ou temperatura. No limite oposto, quando o número de Knudsen tende ao infinito, o regime de escoamento corresponde ao escoamento livre de colisões. Neste caso, colisões intermoleculares não podem ser ignoradas e as colisões das partículas com a superfície do corpo se tornam importantes. A região definida por 0, 1 < Kn < 10 é referênciada como sendo

o regime de transição, onde não somente as colisões gás-superfície mas também as colisões intermoleculares são importantes. No regime de transição, viscosidade, condução de calor, processos de relaxação, químicos e difusivos são importantes. Desse modo, a função distribuição de velocidade pode se afastar da função de Maxwell, o que resulta em um escoamento fora do equilíbrio termodinâmico.

A identificação de um comprimento característico l, Equação 1.1, nem sempre é imediata. De modo a contornar o problema de como selecionar um comprimento característico l para sistemas complexos, um número de Knudsen local é usado ao invés do número de Knudsen global. O número de Knudsen local é definido pela razão entre o livre caminho médio local, λ , e um comprimento de escala definido pelo gradiente de uma propriedade macrocóspica dado pela seguinte expressão:

$$l = \frac{\varphi}{\nabla \varphi} \tag{2.1}$$

onde φ pode ser a massa específica, velocidade, pressão ou temperatura. A Figura 2.1 ilustra as faixas de validade das formulações matemáticas convencionais como função do número de Knudsen local.



Figura 2.1 - Faixas de aplicabilidade dos modelos matemáticos convencionais em função do número de Knudsem local.

Fonte: Adaptado de Bird (1994).
No modelo macroscópico ou modelo de escoamento no contínuo, as expressões gerais dos princípios fundamentais de conservação que governam o movimento dos gases são válidas para todos os regimes de escoamento. No entanto, essas expressões não formam um sistema de equações na forma fechada. A aplicação das equações de conservação requer informações adicionais referente ao tensor tensão e ao vetor fluxo de calor expressos em termos das quantidades macroscópicas. As equações de Euler, para escoamento não-viscoso, assumem que o escoamento está em equilíbrio termodinâmico local, com função distribuição de velocidade em qualquer ponto no escoamento igual a função distribuição de Maxwell. Este é o caso limite em que o número de Knudsen tende a zero.

O modelo de escoamento no contínuo, expresso através das equações de Navier-Stokes, é válido quando o número de Knudsen é muito pequeno em comparação com a unidade. Neste caso, a função distribuição de velocidade se afasta ligeiramente da distribuição de Maxwell. No entanto, este afastamento ainda é suficientemente pequeno de modo que os coeficientes de transporte obtidos através da teoria de Chapman-Enskog sejam válidas (CHAPMAN; COWLING, 1970). Geralmente o termo "equações de Navier-Stokes" se refere as expressões que representam os componentes da conservação da quantidade de momentum linear em fluídos viscosos. Na prática, é comum incluir as equações da conservação da massa e de energia no conjunto de equações, denominado como equações de Navier-Stokes. As equações de Navier-Stokes, na forma em que são normalmente definidas em mecânica dos fluídos, podem ser aplicadas ao estudo de fluídos newtonianos (ou próximos), onde as tensões são linearmente proporcionais com a taxa de deformação.

Boyd et al. (BOYD et al., 1995) apontaram que a função distribuição de velocidade se afasta consideravelmente da função distribuição de Maxwell para número de Knudsen Local Kn > 0,05, indicando que tanto a teoria de Chapman-Enskog quanto as equações de Navier-Stokes deixam de ser válidas. Uma alternativa para o problema da falha das equações de Navier-Stokes seria realizar a expansão de Chapman-Enskog para uma ordem maior, afim de se obter as equações de Burnett (BURNETT, 1935). Cada nível de aproximação implica em uma função distribuição diferente que se desvia da função de distribuição de Maxwell. O interesse nas equações de Burnett, baseada na segunda ordem da expansão de Chapman-Enskog na solução de problemas de escoamentos hipersônicos rarefeitos, vem aumentando ao longo dos anos (COMEAUX et al., ; FISCKO; CHAPMAN, 1988; FISCKO; CHAPMAN, 1989; LUMPKIN III; CHAPMAN, 1992; LEE, 1994; TANNEHILL; EISLER, 1976; ZHONG et al., 1993). Todavia, a aplicação das equações de Burnett apresenta dificuldades adicionais relacionadas com as condições de contorno e com a instabilidade das equações para escoamento envolvendo pequenas perturbações (ZHONG et al., 1993). Ademais, as equações de Burnett aumentam a ordem das equações diferenciais que governam o transporte de momentum e energia no gás. Essas equações são mais difícieis de serem resolvidas numericamente, e falham quando o grau de rarefação é suficientemente alto. As equações de Burnett podem não satisfazer a segunda lei da termodinâmica em determinadas situações, tais como, uma função dissipação negativa ou a presença de um fluxo de calor em um gás isotérmico (COMEAUX et al.,). Finalmente, Cheng e Emanuel (CHENG; EMANUEL, 1995) apresentam uma descrição detalhada das equações de Burnett na solução de problemas de escoamento hipersônico rarefeito.

No modelo microscópico ou modelo de escoamento molecular, o gás é tratado como sendo uma coleção de partículas onde posição e velocidade dessas partículas são acompanhadas individualmente, exigindo a solução da equação de Boltzmann (CER-CIGNANI, 1988). Soluções analíticas da equação de Boltzmann são possíveis para escoamentos livres de colisões, i.e, quando o número de Knudsen tende a infinito. No entanto, dificuldades analíticas são encontradas para número de Knudsen finitos. A equação de Boltzmann é uma equação integral-diferencial com a função distribuição velocidade como a única variável dependente. Em contraste, as equações de Navier-Stokes possuem a velocidade do escoamento e as propriedades termodinâmicas como variáveis dependentes. A redução do número de variáveis dependentes na equação de Boltzmann é feita as custas de um aumento no número de variáveis independentes do espaço físico para o espaço de fase. Deste modo, um problema unidimensional de uma gás monoatômico em regime permanente, se transforma em um problema tridimensional no espaço de fase.

Soluções analíticas da equação de Boltzmann geralmente envolvem modelos moleculares simples, uma variável macroscópica independente e escoamentos com pequenas perturbações. Em contrapartida, problemas de escoamento hipersônico rarefeito estão associados a efeitos físicos complexos, tais como, reações químicas e radiação térmica, que ainda não foram incorporadas na formulação de Boltzmann. Consequentemente, as dificuldades matemáticas associadas com a solução direta da equação de Boltzmann têm estimulado o desenvolvimento de métodos numéricos baseados na física das partículas. A equação de Boltzmann pode ser resolvida numericamente pelos seguintes métodos: método da Dinâmica Molecular (Molecular Dynamics) (ALDER; WAINWRIGHT, 1957; ALDER; WAINWRIGHT, 1958), o método da Partícula Teste (Test Particle Method) (HAVILAND; LAVIN, 1962; HAVILAND, 1965), o método de Integração Numérica Direta (Direct Numerical Integration Method) e o método de Simulação Direta de Monte Carlo (Direct Simulation Monte Carlo - DSMC) (BIRD, 1976; BIRD, 1994).

Considerando-se a proposta deste trabalho, somente o método DSMC será apresentado e discutido.

2.2 Método de Simulação Direta de Monte Carlo - (DSMC)

O método DSMC é uma técnica de simulação numérica baseada na dinâmica das partículas (BIRD, 1976; BIRD, 1994). O método DSMC é fundamentado nos conceitos físicos de gases rarefeitos e nas hipóteses físicas que formam a base para a derivação da equação de Boltzmann (CERCIGNANI, 1988). Entretanto, o método DSMC não é derivado diretamente da equação de Boltzmann. Como ambos, o método DSMC e a equação de Boltzmann, são fundamentados na teoria cinética clássica, então o método DSMC está sujeito as mesmas restrições da equação de Boltzmann, i.e., a hipótese de caos molecular e a restrição de gás diluído.

Atualmente, o método DSMC tem sido reconhecido como uma técnica poderosa capaz de avaliar uma variedade ilimitada de escoamento rarefeito em regime de escoamento onde as equações de Navier-Stokes e as equações para escoamento livre de colisões (escoamento onde as colisões entre partículas são desprezadas quando comparadas com aquelas com o corpo) não são apropriadas. O método tem sido testado em escoamentos no regime de transição nos últimos 40 anos, e tem apresentado excelentes resultados quando comparados com dados experimentais (HARVEY, HARVEY; GALLIS, 2000; HOLDEN; WADHAMS, 2003; HARVEY, 2003).

Comparações com dados experimentais têm dado credibilidade ao método, o que tem sido vital na receptividade do mesmo. As vantagens do método que fazem com que ele seja útil nas aplicações de engenharia são, entre outras, (1) a simplicidade na mudança de problema unidimensional, 1-D, para 2-D e 3-D, (2) a possibilidade de se incorporar modelos complexos de interação gás/superfície, incluindo-se os modelos de graus internos de liberdade e reações químicas, sem maiores complicações no algorítmo computacional, e sem um aumento significante no custo computacional, e (3) a aplicação do método em computação paralela.

O método DSMC modela o escoamento como sendo uma coleção de partículas ¹. Cada partícula possui posição, velocidade e energia interna. O estado da partícula é armazenado e modificado com o tempo quando as partículas se movem, colidem e interagem com a superfície no domínio físico simulado. A hipótese de gás diluído (onde o diâmetro molecular médio é muito menor que o espaço molecular médio no gás) permite que o movimento das moléculas seja desacoplado do processo de colisão. O movimento das moléculas é modelado deterministicamente, enquanto que as colisões são tratadas estatisticamente. Considerando-se ser impossível simular o número real de moléculas no domínio computacional, um número muito menor de moléculas é empregado, cada molécula simulada representando um grande número de moléculas reais. As simulações podem variar de milhares para milhões de moléculas nos problemas de escoamentos rarefeitos.

Uma malha computacional, representando o espaço físico a ser investigado, é utilizada na execução do método. As células na malha computacional servem como referência na obtenção das propriedades macroscópicas do gás através das amostras e dos possíveis pares de moléculas a serem utilizadas nas colisões. As moléculas nas células são consideradas como representativas das moléculas reais na posição da célula, e a posição relativa das moléculas no interior das células é ignorada no processo de colisão das moléculas. As dimensões lineares das células devem ser pequenas comparadas com o livre caminho médio, λ , das moléculas nas direções onde os gradientes das propriedades são mais acentuados (BIRD, 1994).

Uma exigência adicional do método DSMC diz respeito ao número mínimo de moléculas simuladas por célula. Como mencionado anteriormente, o método DSMC utiliza o sistema de células para obter as propriedades macroscópicas através das amostras, bem como a seleção dos pares de moléculas no processo de colisão. Como a taxa de colisão é função do número de moléculas na célula, então é desejável que se tenha em cada célula o maior número possível de moléculas. Entretanto, o possível número de pares de moléculas utilizado no processo da colisão é função do número de moléculas em cada célula. Neste cenário, quanto maior o número de moléculas, maior o possível número de pares para colidir. Como resultado, no processo de colisão, é desejável que se tenha em cada célula o menor número possível de moléculas.

 $^{^1 \}mathrm{Nesta}$ Dissertação, partícula é usado de modo genérico, podendo representar molécula, átomo, etc.

De modo a resolver este conflito Bird (BIRD, 1987) introduziu a opção de subdividir a célula em um número arbitrário de subcélulas para a seleção dos possíveis pares de moléculas para o processo de colisão. Este procedimento melhora a precisão do método por assegurar que as colisões ocorram somente entre moléculas vizinhas. Desse modo, é aconselhável que cada célula possua um número mínimo em torno de 20 a 30 moléculas (BIRD, 1994; SHU et al., 2005).

Uma outra exigência do método DSMC diz respeito ao passo no tempo Δt . As trajetórias das moléculas no espaço físico são acompanhadas considerando-se o desacoplamento entre o movimento das moléculas e as colisões intermoleculares. De modo que, para satisfazer esse desacoplamento, o passo no tempo deve ser pequeno quando comparado com o tempo médio entre as colisões. O tempo na simulação pode ser identificado com o tempo real, e o escoamento é sempre calculado como um escoamento transiente. O escoamento permanente corresponde ao escoamento transiente para grandes períodos de tempo. As condições iniciais não dependem de uma predição do campo de escoamento, mas podem ser especificadas em termos dos estados, tais como escoamento uniforme ou vácuo, que permite uma exata especificação.

2.2.1 Metodologia DSMC

Os passos que involvem a aplicação do método DSMC são ilustrados no fluxograma mostrado na Figura 2.2. O algoritmo DSMC pode ser convenientemente dividido em quatro etapas individuais: movimento das partículas, indexação das partículas, cálculo das colisões e armazenamento das amostras das propriedades moleculares.

O domínio computacional é inicializado com condição de gás em equilíbrio termodinâmico baseado nas condições do meio não-perturbado no espaço físico. Massa específica, temperatura, velocidade e energia interna das moléculas entrando no domínio computacional, durante cada passo no tempo, são especificadas através das condições de contorno conhecidas. A velocidade de uma molécula simulada é definida como uma combinação linear da velocidade térmica e a velocidade do meio não-perturbado. As condições de contorno correspondentes ao escoamento desejado são impostas no início da contagem do tempo, sendo definidas de tal modo que, um escoamento permanente é atingido após decorrido um grande intervalo de tempo. O resultado desejado no regime permanente é obtido através de uma média das amostras armazenadas após alcançar o escoamento permanente.



Figura 2.2 - Fluxograma do método DSMC.

Após definir a posição e a velocidade de cada molécula, todas as moléculas são movidas através de distâncias apropriadas correspondentes as suas componentes de velocidades e ao tamanho do passo no tempo. Após o deslocamento da partícula, sua localização no domínio computacional precisa ser determinada. Isto pode ser obtido de diferentes modos. Para domínios computacionais cartesianos, a nova posição da partícula é rapidamente identificada, e as células de destino são computadas pelo esquema de localização definido por Bird (BIRD, 1994). Para domínios computacionais estruturados e não-estruturados, esquemas de localização da partícula são apresentados por Dietrich e Laux (DIETRICH, 1990; LAUX,), respectivamente.

Para malhas computacionais mais complexas, tais como do tipo hexaedro ou tetrahedro, outras técnicas podem ser usadas para se determinar a posição da partícula (NANCE et al., 1997; WILMOTH et al.,). Após definida a localização das moléculas, ações apropriadas são tomadas no caso das moléculas cruzarem a fronteira sólida, linhas ou superfícies de simetria ou a fronteira exterior do escoamento. Moléculas que saem do domínio computacional são removidas do escoamento. Novas moléculas são introduzidas na simulação, através das fronteiras externas do domínio computacional com condições de contorno do meio não-perturbado. Colisões com as superfícies podem ser tratadas como sendo do tipo especular, difuso ou uma combinação dos dois tipos. O tratamento da interação individual molécula-superfície exige a aplicação das leis de conservação para as moléculas ao invés de se usar a função distribuição de velocidade. Tal aplicação permite que o método DSMC possa incluir efeitos físicos tais como reações químicas, paredes catalíticas, efeitos de radiação e escoamentos ionizados sem maiores modificações no algorítmo básico.

Após a determinação da nova localização das moléculas, elas devem ser indexadas pela localização da célula, para as duas etapas subsequentes: cálculo das colisões intermoleculares e a obtenção das amostras do escoamento. Para a seleção dos pares e o cálculo das colisões intermoleculares, cada célula é definida no sistema de indexação de tal modo que todas as moléculas em seu interior sejam localizadas através de uma lista de referência. Um esquema de indexação eficiente foi apresentado por Bird (BIRD, 1976) na versão original do algoritmo DSMC.

Na etapa seguinte, relacionada com o cálculo das colisões intermoleculares, as interações moleculares são tratadas probabilisticamente ao invés de deterministicamente como no processo de movimentação das moléculas. Diferentes modelos de colisão foram desenvolvidos e implementados no método DSMC. Dentre esses modelos temse a técnica TC (Time-Counter) (BIRD, 1976), o modelo de Nanbu (NANBU, 1986), técnica NC (Null-Collision) (KOURA; MATSUMOTO, 1991), a técnica NTC (No-TimeCounter) (BIRD, 1989), e o esquema generalizado da Técnica NTC (ABE, 1993). O modelo NTC proposto por Bird (BIRD, 1989) é o modelo mais utilizado atualmente. O processo de colisão ocorre em cada célula. Assim sendo o passo no tempo, o volume da célula e o número de moléculas na célula, são parâmetros determinantes no número de possíveis pares de moléculas candidatas no processo da colisão. Os pares de moléculas são escolhidos aleatoriamente com a restrição de que a separação média entre elas seja uma fração do livre caminho médio. Esta restrição é imposta através da seleção dos pares colisionais a partir da lista de moléculas na subcélula. O método DSMC avalia cada par de moléculas no processo de colisão de forma probabilística, garantindo a conservação de momento e energia.

Finalmente, a descrição das etapas é completada considerando-se o processo de amostragem das propriedades macroscópicas do escoamento. Tais propriedades – massa específica, velocidade, temperatura e pressão – são computadas por uma média apropriada a partir das propriedades microscópicas das partículas em cada célula.

2.2.2 Modelo Molecular

O comportamento das moléculas durante o processo de colisão depende da escolha do campo de força intermolecular. Um modelo molecular simples que é eficiente o bastante para a maioria dos cálculos hipersônicos é o campo de força do inverso da potência. O campo de força intermolecular é modelada como sendo o inverso da força repulsiva dada por,

$$F = \frac{k}{r^{\eta}} \tag{2.2}$$

onde r é a distância entre as moléculas que participam da colisão e k e η são as constantes moleculares. O modelo proposto na Equação 2.2 corresponde a um gás de Maxwell para $\eta = 5$. O modelo de "esfera rígida" (do inglês Hard Sphere, HS) é obtido quando $\eta \to \infty$. Em geral, simulações em engenharia envolvem milhões ou bilhões de colisões. Portanto, um modelo de interação molecular simples deveria ser considerado. Neste caso, o modelo mais simples corresponde ao modelo de esfera rígida (HS).

No modelo molecular HS, a seção de choque colisional é constante para gases simples.

O ângulo de espalhamento é isotrópico e a velocidade relativa após a colisão é de uma distribuição de ângulo sólido uniforme. Todavia, o modelo molecular HS não é realístico, uma vez que, a seção de choque colisional total σ_T não depende da velocidade relativa do par de moléculas envolvidas no processo colisional.

Quando o campo de força potencial intermolecular é dado pela Equação 2.2, a teoria de Chapman-Enskog fornece uma relação direta entre o coeficiente de viscosidade e a temperatura do gás dada por:

$$\mu \propto T^{\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{\eta - 1}\right)} \propto T^s \tag{2.3}$$

De acordo com a Equação 2.3, o coeficiente de viscosidade possui expoentes fixos para a temperatura. Este expoente s é de 1 para o modelo maxwelliano e de 0,5 para o modelo HS. Os modelos HS e Maxmellianos são modelos de gases teóricos os quais podem ser considerados como os casos limites para o comportamento de gases reais, uma vez que, para a maioria dos gases reais s está geralmente na faixa de 0,6 a 0,9.

Modelos moleculares alternativos, baseados no modelo HS, vêm sendo propostos. Esses modelos têm mostrado ser eficientes na reprodução do comportamento macroscópico do gás além de possuírem eficiência computacional. O primeiro modelo alternativo foi definido como modelo VHS (do inglês Variable Hard Sphere) desenvolvido por Bird (BIRD, 1981). O modelo VHS trata as moléculas como "esferas rígidas" no que diz respeito a distribuição do ângulo de espalhamento, i.e, todas as direções são igulamente possíveis para as velocidades após a colisão, em um sistema de referência baseado no centro de massa. Além disso, a seção de choque total σ_T varia com a velocidade relativa entre as moléculas. O modelo VHS tem sido o modelo molecular mais utilizado nas aplicações com DSMC. Tem sido recomendado para cálculos em engenharia, uma vez que, para a maior parte dos escoamentos de interesse, tem-se observado que a variação na seção de choque colisional é muito mais influênciada pela estrutura do escoamento do que por qualquer variação nas características do espalhamento molecular.

O modelo VHS, possui um diâmetro molecular (d) bem definido e segue a clássica lei de espalhamento do modelo HS. Este diâmetro é o inverso da função da lei de potência da energia colisional relativa entre as moléculas que estão colidindo, desta forma,

$$\sigma \equiv \pi d^2 \quad \propto \quad (\frac{1}{2}m_r c_r^{\ 2})^{-\omega} \tag{2.4}$$

onde m_r é a massa reduzida, c_r é a velocidade colisional relativa e ω um expoente a ser definido subsequentemente.

A seção de choque colisional σ varia com a temperatura T e a velocidade relativa colisional de acordo com a seguinte expressão:

$$\sigma \propto c_r^{-4(\eta-1)} \propto T^{-2/(\eta-1)}$$
(2.5)

A comparação da Equação 2.4 com a Equação 2.5, mostra que ω está relacionado ao expoente do inverso da lei de força molecular da seguinte forma:

$$\omega = \frac{2}{\eta - 1} \tag{2.6}$$

Observa-se que ω é igual a zero para o modelo HS, 1/4 para o modelo de potência inversa, e 1/2 para o modelo de Maxwell. A energia colisional média em um gás em equilíbrio sob uma temperatura T é:

$$1/2m_r c_r^2 = 2 * \left(\frac{\eta - 2}{\eta - 1}\right) KT = (2 - \omega) KT$$
(2.7)

onde K é a constante de Boltzmann. Para um gás em equilíbrio termodinâmico, a seção de choque colisional é inversamente proporcional a temperatura elevada a $-\omega$,

$$\sigma = \sigma_{ref} (\frac{T}{T_{ref}})^{-\omega} \tag{2.8}$$

O valor de referência para a seção de choque é baseado em uma temperatura de referência T_{ref} . Para um gás em não-equilíbrio termodinâmico, a energia colisional deve ser usada, logo a Equação 2.4 pode ser escrita como:

$$\sigma = \sigma_{ref} \left(\frac{c_r^2}{c_{ref}^2}\right)^{-\omega} \tag{2.9}$$

O valor de referência do quadrado da velocidade relativa colisional pode ser escolhida como valor médio de c_r^2 em um gás em equilíbrio sob uma tempreratura de referência. As Equações (2.7) e (2.9), podem ser combinadas a dar:

$$\sigma = \sigma_{ref} \left(\frac{m_r c_r^2}{2(2-\omega)KT_{ref}}\right)^{-\omega}$$
(2.10)

O código DSMC fixa d_{ref} , $T_{ref} \in \omega$ como dados e a Equação 2.10 é usada para obter σ como função de c_r . No modelo VHS o livre caminho médio em um gás em equilíbrio termodinâmico é dado por,

$$\lambda = \frac{(T/T_{ref})^{\omega}}{(2-\omega)^{\omega}\Gamma(2-\omega)2^{\frac{1}{2}}n\sigma_{ref}}$$
(2.11)

Como resultado, o livre caminho médio λ aumenta com a temperatura de acordo com a mesma lei de potência na qual a seção de choque decresce.

Em um gás real, o coeficiente de viscosidade é dado em função da temperatura por:

$$\mu \propto T^{\zeta}$$
 (2.12)

onde o expoente ζ está geralmente na faixa de 0,6 a 0,9. Para um gás em equilíbrio termodinâmico, a seção de choque média é dada por:

$$\bar{\sigma} \propto T^{-\omega}$$
 (2.13)

O coeficiente de viscosidade baseado na teoria de Chapman-Enskog é dado por:

$$\mu = \frac{(15m/8)(\pi RT)^{\frac{1}{2}}}{(2-\omega)^{\omega}\Gamma(4-\omega)\bar{\sigma}}$$
(2.14)

onde m é a massa molecular e R a constante dos gases. Comparando-se as Equações (2.12), (2.13) e (2.14) tem-se que,

$$\zeta = \frac{1}{2} + \omega \tag{2.15}$$

Logo, da combinação das Equações (2.11) e (2.15), obtem-se a equação do livre caminho médio em função da variável ζ , como,

$$\lambda = \frac{(2\mu/15)(7-2\zeta)(5-2\zeta)(2\pi RT)^{\frac{-1}{2}}}{\rho}$$
(2.16)

onde ζ é o expoente definido como índice de viscosidade, R é a constante dos gases , T é a temperatura e ρ é a massa específica do gás.

Koura e Matsumoto (KOURA; MATSUMOTO, 1991; KOURA; MATSUMOTO, 1992), aprimoraram o modelo VHS e introduziram o modelo molecular VSS (Variable Soft Sphere). O modelo VSS considera o espalhamento pós - colisional anisotrópico. O segundo parâmentro livre, introduzido pela dinâmica de espalhamento pós - colisional no modelo VSS, é escolhido de modo a reproduzir corretamente os coeficientes reais de viscosidade e difusão dos gases. Hassan e Hash (HASSAN; HASH, 1993) introduziram o modelo molecular GHS (Generalized Hard Sphere). O modelo molecular GHS leva em consideração as partes atrativa e repulsiva da interação partícula-partícula. Nesse modelo, as moléculas se espalham como esferas rígidas (HS), como considerado no modelo VHS. Desde que o modelo GHS é capaz de reproduzir os efeitos da porção atrativa da interação potencial, então o modelo é apropriado para simular escoamentos a baixas temperaturas os quais são dominados por colisões atrativas (HASH et al., 1994; KUNC et al., 1995).

2.2.3 Modelo Colisional

Diferentes tipos de modelos colisionais aplicados no método DSMC foram apresentados anteriormente na Subseção 2.2.1. Dentre eles, a técnica TC (BIRD, 1976), o esquema de Nanbu (NANBU, 1986), a técnica NC (KOURA; MATSUMOTO, 1991), a técnica NTC (BIRD, 1989) e o esquema generalizado (ABE, 1993) da técnica NTC. Para o objetivo deste trabalho, somente a técnica TC e NTC serão descritos.

Os procedimentos para a obtenção de uma taxa de colisão correta são baseados nas células, enquanto os pares colisionais são escolhidos nas subcélulas. O passo no tempo Δt , o volume da célula V_c , e o número de moléculas N em cada célula determinarão o possível número de pares colisionais a ser avaliado. A partir da teoria cinética, pode ser mostrado que o número de colisões que deve ser simulado através de um passo Δt é dado por:

$$N_{coll} = \frac{1}{2} N \Delta t n \overline{\sigma_T c_r} \tag{2.17}$$

onde n é a concentração de moléculas.

De modo a se determinar corretamente o número total de colisões durante o passo no tempo Δt , seria necessário calcular o produto médio da velocidade relativa c_r com a seção de choque colisional σ_T para todos os possíveis pares de moléculas. Um algoritmo que usa este tipo de procedimento teria um tempo computacional proporcional a N^2 , onde N é o número total de moléculas simuladas. De modo a contornar esta dificuldade, Bird (BIRD, 1976) introduziu o parâmetro $(\sigma_T c_r)_{max}$, onde o subscrito max denota o maior valor para o produto na célula, e deveria ser atualizado durante uma colisão binária se o produto real $\sigma_T c_r$ fosse maior do que o então $(\sigma_T c_r)_{max}$. Além disso, o parâmetro $(\sigma_T c_r)_{max}$ é usado para determinar uma colisão real de acordo com as seguintes operações:

• (1) Duas moléculas são selecionadas aleatoriamente na célula. A probabilidade de que estas moléculas colidam é dada por:

$$P = \frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{max}} \tag{2.18}$$

se a probabilidade P é maior do que R_f , então o par de moléculas é aceito para a colisão. R_f é um número aleatório que varia na faixa de 0 a 1. Caso P seja menor do que R_f , um novo par é escolhido aleatoriamente e o procedimento é repetido. Este método de aceitação-rejeição foi descrito por Bird (BIRD, 1994) para selecionar o par colisional de moléculas.

• (2) Se o par de moléculas é aceito para o processo de colisão, então a contagem do tempo para a célula em questão é avançada de uma quantidade

$$\delta t = \frac{2}{Nn\sigma_T c_r} \tag{2.19}$$

• (3) O número de colisões na célula é calculado até que o somatório dos δt seja ligeiramente maior que o passo no tempo Δt . Este é o esquema TC proposto por Bird (BIRD, 1976).

No esquema TC, o número total de colisões dentro de um determinado passo no tempo Δt depende do produto $\sigma_T c_r$ relacionado com os pares colisionais, que são escolhidos aleatoriamente. Além disso, não é possivel calcular o número total de colisões no início do passo no tempo. Consequentemente, uma vetorização completa do processo colisional não é possível. Esta dificuldade no método TC é devido a dependência do vetor ser associada com a implementação do somatório de diversos valores de δt dada pela Equação (2.19) (BAGANOFF; MCDONALD, 1990).

No esquema NTC, o incremento no tempo relacionado com a escolha aleatória do par de moléculas é independente do produto real $\sigma_T c_r$. O parâmetro $(\sigma_T c_r)_{max}$ é fixado durante o incremento do tempo Δt e modificado após todas as colisões terem sido realizadas. A idéia da contagem do tempo é substituída pela expressão do número total de colisões N_{coll} obtida em cada célula por,

$$N_{coll} = \frac{1}{2} \frac{N\bar{N}F_N(\sigma_T c_r)_{max}\Delta t}{V_c}$$
(2.20)

onde F_N é o número de moléculas reais representado por uma única molécula simulada, N é o número de moléculas dentro da célula e \bar{N} é um valor médio. A probabilidade da colisão para cada par escolhido é dada pela Equação (2.18).

O esquema NTC foi introduzido de modo a minimizar as dificuldades encontradas com o esquema TC em determinadas regiões onde o escoamento está fora do equilíbrio termodinâmico, por exemplo, fortes ondas de choque. O problema está relacionado a aceitação de improváveis pares de moléculas para colisão, i.e, pares com relativamente pequena probabilidade colisional (uma com um valor muito pequeno de $\sigma_T c_r$). Sob tais condições, o incremento de tempo determinado pela Equação (2.19) pode exceder substancialmente o passo no tempo Δt .

2.2.4 Colisões Binárias Elásticas

2.2.4.1 Velocidade Relativa

Dadas duas moléculas, suas velocidades pré-colisionais podem ser denotadas por c_1 e c_2 . Dadas as propriedades físicas das moléculas e a orientação de suas trajetórias, pode-se determinar suas velocidades pós-colisionais c_1^* e c_2^* . Energia e momento devem ser conservados no processo colisional de forma que:

$$m_1 \mathbf{c}_1 + m_2 \mathbf{c}_2 = m_1 \mathbf{c}_1^* + m_2 \mathbf{c}_2^* = (m_1 + m_2) \mathbf{c}_m$$
(2.21)

$$m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 = m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2}$$
(2.22)

onde $m_1 e m_2$ são as massas moleculares das duas moléculas respectivamente e c_m é a velocidade do centro de massa das duas moléculas. A Equação (2.21) mostra que a velocidade do centro de massa não se altera com o processo colisional. Os valores pré- e pós-colisionais da velocidade relativa entre as moléculas podem ser definidos por:

$$c_r = c_1 - c_2$$
 $c_r^* = c_1^* - c_2^*$ (2.23)

As Equações (2.21) e (2.23) podem ser combinadas para fornecer as seguintes expressões:

$$c_1 = c_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r$$
 $c_2 = c_m - \frac{m_1}{m_1 + m_2} c_r$ (2.24)

Da mesma forma, tem-se para as componentes pós-colisionais como sendo:

$$c_1^* = c_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r^* \qquad c_2^* = c_m - \frac{m_1}{m_1 + m_2} c_r^*$$
 (2.25)

A conservação do momento angular requer que a distância projetada entre as velocidades pós-colisionais seja igual a distância projetada entre as velocidades précolisionais, desta forma, as Equações (2.24) e (2.25) mostram que:

$$m_1 \mathbf{c}_1^2 + m_2 \mathbf{c}_2^2 = (m_1 + m_2) \mathbf{c}_m^2 + m_r \mathbf{c}_r^2$$

$$m_1 \mathbf{c}_1^{*2} + m_2 \mathbf{c}_2^{*2} = (m_1 + m_2) \mathbf{c}_m^2 + m_r \mathbf{c}_r^{*2}$$
(2.26)

onde, m_r é dado por,

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{2.27}$$

Uma comparação entre a Equação (2.26) com a equação da energia, Equação (2.22), mostra que a magnitude da velocidade relativa não se altera com o processo colisional, i.e,

$$\boldsymbol{c_r}^* = \boldsymbol{c_r} \tag{2.28}$$

Desde que c_m e c_r possam ser calculadas a partir de velocidades pré-colisionais, a determinação das velocidades pós-colisionais reduz-se ao cáculo da mudança da direção χ do vetor velocidade relativa. Se F é a força entre dois pontos de força esfericamente simétricos e r_1 e r_2 os seus vetores posição, as equações do movimento das moléculas são:

$$m_1 \ddot{r_1} = F$$

$$m_2 \ddot{r_2} = -F$$
(2.29)

consequentemente,

$$m_1 m_2 (\ddot{r_1} - \ddot{r_2}) = (m_1 + m_2)F \tag{2.30}$$

ou se o vetor velocidade relativa é denotado por $\dot{r},$

$$m_r \ddot{r} = F \tag{2.31}$$

O movimento da molécula de massa m_1 relativa a molécula de massa m_2 é, no entanto, equivalente ao movimento da molécula de massa m_r relativa ao centro de força fixo.



Figura 2.3 - colisão binária do esquema de referência no centro de massa.

A mudança para o sistema coordenado em relação ao centro de massa transforma uma trajetória tridimensional em uma trajetória bidimensional. As transformações são simétricas sob a linha AA'. As duas trajetórias são reduzidas a uma, favorecendo a transformação para o sistema de referência no centro de massa reduzido, e sua trajetória permanece simétrica sob a linha que passa através do centro O. Esta simetria reflete a simetria das equações referentes as velocidades pré- e póscolisionais. Outra consequência desta simetria se torna aparente se for considerado a colisão entre duas moléculas de velocidade $c_1^* \in c_2^*$, desta maneira a separação em suas trajetórias não-perturbadas no sistema referencial de centro de massa é novamente igual a b, conforme mostrado na Figura 2.3. Os resultados colisionais nas velocidades pós-colisionais de $c_1 \in c_2$ são chamadas de o inverso da original ou direção colisional.

2.2.4.2 Seção de Choque

Considerando-se uma colisão entre uma molécula da espécie p com outra da espécie q, o diâmetro efetivo será d_p e d_q , e o requisito para a colisão será que a distância de seus centros de massa diminua até $(d_p + d_q)/2$. A seção de choque total será, portanto:

$$\sigma_{Tpq} = \frac{\pi (d_p + d_q)^2}{4} = \pi d_{pq}^2 \tag{2.32}$$

A taxa de colisão média para as moléculas da espécie p com as moléculas da espécie q é dado como se segue,

$$\nu_{pq} = n_q \overline{\sigma_{Tpq} c_{rpq}} \tag{2.33}$$

onde c_{rpq} é a velocidade relativa entre as duas moléculas.

2.2.5 Graus Internos de Liberdade

Um dos efeitos mais significantes observados em escoamentos rarefeitos diz respeito a presença de desequilíbrio entre vários modos de energia interna do gás. Para gases poliatômicos, a tranferência de energia para os modos internos e dos modos internos precisa ser considerada. No entanto, a tranferência de energia entre os graus de liberdade translacional, rotacional e vibracional não podem ser computados eficientemente usando-se modelos colisionais simples. A tranferência de energia interna entre os vários modos é implementado no método DSMC por um modelo phenomenológico introduzido por Borgnakke e Larsen (BORGNAKKE; LARSEN, 1975). A principal característica deste modelo é que uma fração ϕ das colisões translacionais são assumidas como sendo inelásticas, e o restante das colisões ($1-\phi$) são consideradas como elásticas. A fração ϕ pode ser interpretada como uma probabilidade média da troca de energia vibracional ou rotacional para colissões translacionais. Esta probabilidade média pode ser determinada a partir de medidas de tempos de relaxação. O tempo de relaxação é função das propriedades locais do escoamento e pode ser relacionada com o número de relaxação (ou número colisional) Z. O número de relaxação ou colisional Z é normalmente definido por:

$$Z = \frac{\tau}{\tau_c} \tag{2.34}$$

onde τ é o tempo de relaxação e τ_c é o tempo colisional médio. O número de relaxação ou número colisional é o número médio de colisões moleculares necessárias para que um modo particular atinja a energia de equilíbrio. Portanto, uma vez determinado este número, a probabilidade média ϕ para cada modo em uma dada colisão é convenientemente definida como,

$$\phi = \frac{1}{Z} \tag{2.35}$$

Normalmente, os cáculos DSMC usam o número de colisão rotacional Z_R em torno de 5. Isto significa que, em média, uma molécula tem a sua relaxação rotacional atingida após cinco colisões. Isto geralmente é uma boa aproximação em problemas de engenharia. Entretanto, modelos mais realísticos para o número de colisão rotacional como função da temperatura translacional ou da energia translacional, vem sendo proposto (BOYD, 1990a; BOYD, 1990c; BOYD, 1990d). Lumpkin (LUMPKIN III et al., 1991) observou que os mecanismos de transferência de energia empregados nos cálculos DSMC afetam a taxa de transferência de energia. De acordo com Lumpkin, o valor do número colisional usado no DSMC deve ser aproximadamente a metade daquele determinado experimentalmente e empregado na computação no modelo do contínuo. Neste cenário, a seguinte relação é aplicada:

$$Z_R^{DSMC} = \frac{Z_R^{Cont}}{(1 + \frac{\zeta_R}{\zeta_T})}$$
(2.36)

onde $\zeta_R \in \zeta_T$ são os graus de liberdade rotacional e translacional, respectivamente.

O número de relaxação vibracional Z_V é também computado como função das propriedades do escoamento. O número de relaxação pode ser facilmente determinado se a frequência de colisão e o tempo de relaxação são conhecidos (Equação 2.34). O tempo de relaxação do modo vibracional é normalmente, pelo menos, uma ordem de magnitude maior do que aqueles associados com os modos tranlacional e rotacional. Nas aplicações com DSMC, o número de relaxação vibracional Z_V empregado é da ordem de 50. Isto significa que, na média, a relaxação vibracional ocorre para uma em cada cinquenta colisões. O método de Larsen- Borgnakke pode ser aplicado para os modos vibracionais utilizando-se um procedimento clássico ou quântico. No procedimento clássico, a energia vibracional é tratada como uma distribuição contínua descrita pelo número de graus de liberdade vibracional ζ_V na qual é fixado. No procedimento quântico, a natureza discreta do espectro vibracional é levada em conta, uma vez que o espectro vibracional de moléculas reais é caracterizado por grandes espaçamentos entre os níveis de energia vizinhos. O procedimento quântico permite a amostragem dos níveis de energia vibracional pós-colisional a partir da forma discreta do modelo SHO (Simple Harmonic Oscillator). Este procedimento não exige que o valor ζ_V seja estimado para todo o campo de escoamento. Em contrapartida, ζ_V varia de acordo com a energia local contida no escoamento. Ambos os procedimentos – clássico e quântico – são discutidos em detalhes por Bird (BIRD, 1994). O número de relaxação vibracional como função da energia colisional é apresentada em Boyd e Bergemann (BOYD, 1990b; BOYD, 1991; BERGEMANN; BOYD, 1994) e como função da temperatura por Hash e Hassan (HASH; HASSAN, 1993).

2.2.6 Implementação das Condições de Contorno

Nos problemas de dinâmicas de gases existem dois tipos básicos de condições de contorno: aqueles especificados pelas quantidades dadas pelo meio não-perturbado e aqueles sobre uma superfície sólida onde as moléculas interagem ou refletem diretamente.

A primeira condição é facilmente representada por um gás em equilíbrio movendose com uma velocidade prescrita. A distribuição da velocidade molecular pode ser dada como sendo uma distribuição Maxweliana com uma velocidade do meio nãoperturbado prescrita. Esta distribuição é válida para qualquer gás ideal, independentemente do tipo das forças entre as moléculas. A segunda condição depende do tratamento da interação gás-superfície. A influência do modelo das interações gás-superfície nas forças aerodinâmicas e transferência de calor aumenta substancialmente com o aumento da rarefação do gás. Portanto, a escolha correta do modelo para o cálculo de escoamento hipersônico rarefeito tem um papel fundamental.

Três modelos de interação gás-superfície podem ser empregados no método DSMC: especular, difusa ou uma combinação das duas. Na reflexão especular, as moléculas são refletidas como uma esfera perfeitamente elástica com a reversão da componente normal da velocidade e sem nenhuma mudança nas componentes tangenciais das velocidades e na energia. Na reflexão difusa, as moléculas são refletidas igualmente em todas as direções com acomodação térmica completa. As componentes da velocidade das moléculas refletidas são independentes de sua direção e velocidades incidentes. A combinação da reflexão difusa com a reflexão especular (modelo de Maxwell) introduz um simples parâmetro f para indicar a fração das moléculas refletidas difusamente, de acordo com a distribuição Maxwelliana correspondente a temperatura da superfície do corpo. A fração (1-f) é assumida como reflexão especular.

O modelo de Maxwell foi seguido pela introdução de três coeficientes de acomodação que descrevem o grau de acomodação do momento incidente normal, momento tangencial e energia cinética para aqueles da superfície. Uma variedade de definições para coeficientes de acomodação existe na literatura. A definição tradicional é normalmente expressa como sendo:

$$\alpha_r = \frac{e_i - e_r}{e_i - e_w} \tag{2.37}$$

$$\alpha_n = \frac{p_i - p_r}{p_i - p_w} \tag{2.38}$$

$$\sigma_t = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i} \tag{2.39}$$

onde $e_i \tau_i$ e p_i são os fluxos de energia e de momentos tangencial e normal, respectivamente, incidentes na superfície; e_r , τ_r e p_r são os fluxos destas quantidades refletidas da superfície; e e_w e p_w ($\tau_w = 0$) são os fluxos os quais seriam refletidos pelo gás em completo equilíbrio maxwelliano com a superfície. O modelo de reflexão de Maxwell pode ser melhor visualizado conforme a Figura (2.4).



Figura 2.4 - Modelo de reflexão de Maxwell.

3 PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL

3.1 Definição da Geometria

As imperfeições ou distorções presentes na superfície de veículos na reentrada serão modeladas por degraus com face a montante e a jusante em relação ao escoamento. Considerando-se que a altura h do degrau é, geralmente, da ordem de 3 a 9 mm (EVERHART et al., 2006; GAI; MILTHORPE, 1995; GROTOWSKY; BALLMANN, 2000; HOZUMI et al., 2004; HINDERSKS; RADESPIED, 2006; JACKSON et al., 2001) e que o raio de curvatura R do bordo de ataque de um veículo na reentrada (Figura 1.1) é de aproximadamente duas ordens de magnitude maior do que esses valores, então $h/R \ll 1$. Neste cenário, o escoamento ao redor do degrau no veículo pode ser modelado como sendo o escoamento sobre uma placa plana com um degrau com face a montante ou a jusante.

A Figura 3.1 apresenta um desenho esquemático do modelo adotado e ilustra os principais parâmetros relacionados com o escoamento hipersônico a ser investigado no regime de transição, i.e., entre o regime do contínuo e o regime livre de colisões.



Figura 3.1 - Degrau com face a montante e a jusante.

De acordo com a Figura 3.1, M_{∞} representa o número de Mach do escoamento no

meio não-perturbado, α o ângulo de ataque do escoamento incidindo sobre a placa, h a altura do degrau, e D representa a localização do degrau.

Deste modo, para a família de degraus a ser investigada neste trabalho, D, $h \in L$ são listados na Tabela 3.1. Conforme mostradas na tabela, três diferentes alturas serão investigadas, perfazendo um total de seis casos. Na tabela, $D \in L$ foram normalizados pelo livre caminho médio molecular do meio não-perturbado λ_{∞} , a ser definido posteriormente.

Caso	Degrau	$h (\rm{mm})$	D/λ_{∞}	L/λ_{∞}
А	a montante	3	50	100
В	a montante	6	50	100
\mathbf{C}	a montante	9	50	100
D	a jusante	3	50	170
\mathbf{E}	a jusante	6	50	170
F	a jusante	9	50	170

Tabela 3.1 - Características geométricas dos degraus.

De modo a se obter um melhor entendimento dos efeitos dos parâmetros geométricos, $h \in D$, do número de Mach M_{∞} e do ângulo de ataque α (Figura 3.1) na estrutura do escoamento bem como nas propriedades aerodinâmicas, torna-se necessário comparar tais efeitos com aqueles em uma placa plana livre de imperfeições, i.e., sem degraus. Deste modo, a solução obtida para uma placa plana livre de imperfeições servirá de referência (benchmark) para os casos com degraus.

3.2 Condições da Simulação Numérica

A equação de Boltzmann é a equação que expressa os princípios físicos fundamentais para escoamentos no regime de transição. Trata-se de uma equação não-linear, integro-diferencial com uma variável dependente dada pela função distribuição das partículas. As propriedades das partículas são determinadas em um espaço de seis dimensões, espaço de fase, composto por três dimensões para a posição coordenada das partículas e três dimensões para as velocidades. Um tratamento detalhado da equação de Boltzmann pode ser obtido em Cercignani (CERCIGNANI, 1988).

Como apontado no Capítulo 2, de modo a contornar as dificuldades na solução direta da equação de Boltzmann, o método DSMC vem sendo considerado como um dos principais métodos alternativos na solução da equação de Boltzmann através da simulação do comportamento individual das partículas. Vem sendo considerado, também, como o método apropriado para problemas envolvendo escoamento hipersônico rarefeito.

O código DSMC utilizado no presente estudo foi desenvolvido baseado nos mesmos conceitos físicos como descrito por Bird (BIRD, 1994). Neste trabalho, as colisões foram modeladas utilizando-se o modelo molecular VHS (Variable Hard Sphere) e o método NTC (No Time Counter), conforme descritos no Capítulo 2. A troca de energia translacional com os modos internos de energia – rotacional e vibracional – foi controlada pelo modelo fenomenológico de Borgnakke-Larsen (BORGNAKKE; LARSEN, 1975). As simulações foram realizadas considerando-se ar como fluido de trabalho com duas espécies químicas, N_2 e O_2 . Reações químicas – dissociação e recombinação – não foram consideradas.

A probabilidade de uma colisão inelástica determina a taxa na qual energia é transferida entre o modo de translação e os modos internos após uma colisão inelástica. Para uma dada colisão, a probabilidade é definida pelo inverso do número de relaxação, que corresponde ao número de colisões necessárias, na média, para que uma molécula sofra relaxação. O número de relaxação foi assumido como constante, da ordem de 5 para rotação e 50 para a vibração. O mecanismo da troca de energia de vibração foi levado em conta através do método de Borgnakke-Larsen (BORGNAKKE; LARSEN, 1975), com os níveis de energia de vibração sendo obtidos considerando-se o modelo SHO (Simple Harmonic Oscillator)(BIRD, 1994).

Os modelos de relaxação rotacional e vibracional empregados nesta simulação são ajustados baseados nos valores para o contínuo conforme mostrado na Equação (2.34). O coeficiente de viscosidade do meio não-perturbado μ_{∞} e o livre caminho médio molecular λ_{∞} foram avaliados a partir de definições consistentes (BIRD, 1983) considerando-se o modelo molecular VHS com o expoente da temperatura ζ , da Equação (2.12), igual a 0,74 e 0,77 para N_2 e O_2 , respectivamente. A Tabela 3.2 apresenta as principais características do fluido de trabalho empregados nas simulações deste trabalho.

O domínio computacional utilizado nas simulações é grande o suficiente de modo que as perturbações, devido a presença do corpo, não alcançam as fronteiras do domínio, onde as condições do meio não-perturbado são especificadas. O campo de

Propriedades	Valores	Unidade
Fluído de trabalho	$N_2 + O_2$	
Peso molecular	$28,\!96$	kg/kgmole
Massa molecular O_2	$5,312 \times 10^{-26}$	kg
Massa molecular N_2	$4,650 \times 10^{-26}$	kg
Diâmetro molecular O_2	$4,010 \times 10^{-10}$	m
Diâmetro molecular N_2	$4,110 \times 10^{-10}$	m
Fração molar O_2	0,237	
Fração molar N_2	0,763	
Expoente de viscosidade O_2	0,77	
Expoente de viscosidade N_2	0,74	
Graus de liberdade O_2	5 a 7	
Graus de liberdade N_2	5 a 7	

Tabela 3.2 - Principais propriedades do fluido de trabalho.

escoamento foi dividido em um número arbitrário de regiões. Cada região possui um valor para o passo no tempo Δt e um fator de escala F_N , o qual relaciona o número de moléculas reais com o número de moléculas simuladas. Um desenho esquemático do domínio computacional é apresentado na Figura 3.2.

De acordo com a Figura 3.2, o lado I-A representa a superfície do degrau. Reflexão difusa é a condição aplicada neste lado do domínio computacional. Esta condição é aplicada individualmente as moléculas interagindo com a superfície do degrau. O lado I-B representa uma superfície onde os gradientes normais a superfície são nulos. No nível molecular, esta condição de contorno representa uma reflexão especular, onde a componente normal da velocidade incidente da molécula é invertida, enquanto a componente paralela é mantida inalterada. Os lados II e III representam os lados onde as condições do meio não-perturbado são aplicadas e por onde as moléculas entram no domínio computacional. Moléculas deixando o domínio por estes lados são retiradas do campo de escoamento. Estes lados corresponderão a representação física correta do meio não-perturbado tão logo as perturbações no escoamento, devido a presença do corpo, não atinjam tais fronteiras. Finalmente, o lado IV é uma fronteira com condição de contorno definida por vácuo ou por um grupo de moléculas deixando ou entrando no domínio computacional. A opção por vácuo é normalmente utilizada quando a velocidade do gás através da fronteira é supersônica. Para escoamento com número de Mach igual ou maior que três (BIRD, 1994), o fluxo de moléculas atravessando a fronteira pode ser desprezado. Deste modo, vácuo é a condição de



Figura 3.2 - Desenho esquemático do domínio computacional.

contorno aplicada ao lado IV. O efeito a montante no escoamento, devido a aplicação desta condição de contorno, pode ser estimado aumentando-se o comprimento do corpo.

O processo de geração da malha computacional, o estudo do efeito do número de células bem como o efeito do número de moléculas empregados neste trabalho serão descritos no capítulo subsequente.

3.3 Condições do Escoamento e Meio Não-Perturbado

Baseado na Figura 3.1, os principais parâmetros – físicos e geométricos – podem ser identificados pelo número de Mach M_{∞} do meio não-perturbado, o ângulo de ataque α , a altura h do degrau e a distância D. Acrescenta-se, também, a temperatura da superfície do degrau T_w bem como a interação gás-superfície. Neste cenário, a estrutura do escoamento sobre o degrau pode ser alterada devido aos efeitos de compressibilidade, de rarefação, da interação gás-superfície, da temperatura

da superfície, etc.

O presente trabalho apresenta a influência da altura h do degrau na estrutura do escoamento. O efeito da altura do degrau foi investigado para h de 3, 6 e 9 mm, com as condições do escoamento similares a aquelas submetidas a cápsula SARA em uma altitude de 70 km. SARA é a denominação de um <u>SA</u>télite <u>R</u>ecuperável <u>A</u>tmosférico em desenvolvimento no Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE) do Comando-Geral de Tecnologia Aeroespacial (CTA).

A Tabela 3.3 apresenta as condições do meio não-perturbado. A velocidade do meio não-perturbado U_{∞} é assumida constante como sendo de 7.456 m/s, a qual corresponde um número de Mach M_{∞} de 25. A temperatura da superfície do degrau T_w foi assumida constante no valor de 880 K. Esta temperatura é representativa da temperatura estimada para a superfície da cápsula SARA. Machado e Boas (MACHADO et al., 2006) mostraram que a temperatura no ponto de estagnação da cápsula SARA pode atingir um valor máximo de 950 K, para as condições investigadas. Reflexão difusa com acomodação térmica completa foi assumida para a interação gás-superfície. Considerou-se, também, que o escoamento está alinhado com o degrau, i.e., ângulo de ataque $\alpha = 0$ graus.

Propriedades	Valor	Unidade(SI)
Velocidade (U_{∞})	7.456	m/s
Temperatura (T_{∞})	$219,\!69$	Κ
Pressão (p_{∞})	$5,\!582$	N/m^2
Massa específica (ρ_{∞})	$8,753 x 10^{-5}$	kg/m^3
Concentração de moléculas (n_{∞})	$1,819 \mathrm{x} 10^{21}$	m^{-3}
Viscosidade (μ_{∞})	$1,455 \mathrm{x} 10^{-5}$	Ns/m^2
Livre caminho médio (λ_{∞})	$9,285 \text{x} 10^{-4}$	m^{-3}

Tabela 3.3 - Principais propriedades do meio não-perturbado.

Considerando-se a altura h do degrau como comprimento característico, tem-se que o número de Knudsen Kn_h , baseado na definição da Equação (1.1), corresponde a 0,3095, 0,1548 e 0,1032 para h igual a 3, 6, e 9 mm, respectivamente. Finalmente, o número de Reynolds por unidade de comprimento, Re/m, é de 45.395, e Re_h igual a 136, 272 e 409 para h igual a 3, 6, e 9 mm, respectivamente.

4 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO

Antes da apresentação dos resultados computacionais, torna-se imperativo a apresentação do processo de verificação e validação do código DSMC utilizado. A verificação e validação devem estabelecer a confiança de que o código computacional é adequado ao uso pretendido. No que se refere ao código DSMC, o processo de verificação e validação consiste de três etapas básicas: (1) verificar o número de células adequado, (2) verificar o número de moléculas adequado, e (3) comparar resultados numéricos gerados pelo código para casos testes com resultados experimentais ou analíticos disponíveis na literatura. Neste contexto, o propósito deste capitulo é discutir estas três etapas em detalhes.

4.1 Requisitos Computacionais

O método DSMC vem sendo desenvolvido ao longo dos últimos 40 anos visando estudar fenômenos complexos de escoamentos no regime de transição. Para este método, uma malha computacional deve ser definida com o propósito de servir como referência no processo de seleção dos pares colisionais e no processo de amostragem e média das propriedades microscópicas, onde as propriedades macroscópicas do escoamento são obtidas.

Uma grande parte de problemas práticos envolve corpos com formas complexas, e a geração de uma malha apropriada pode exigir tempo e custo computacional. Numerosos esforços no desenvolvimento de malhas alternativas de modo a reduzir o custo computacional resultaram em diferentes esquemas de geração de malha: estruturado, não estruturado, bloco por zona, cartesiano, entre outros. Dentre as contribuições, destacam-se o sistema de coordenadas ajustadas ao corpo (body fitted) implementado por Abe (ABE, 1989), o método de interpolação transfinita apresentado por Olynick et al. (OLYNICK et al., 1989) e a malha cartesiana com multi-níveis proposta por Rault (RAULT, 1994). Em geral, três tipos básicos definem os esquemas de geração de malha: (1) a malha cartesiana uniforme, (2) a malha estruturada de coodenadas ajustadas ao corpo, e (3) a malha não-estruturada de coordenadas ajustadas ao corpo. Cada esquema apresenta vantagens e desvantagens como, por exemplo, um menor custo na fase de movimentação das moléculas, o uso de células com dimensões não-uniformes em regiões onde os gradientes são mais intensos, e aplicação na simulação de geometrias complexas. Os méritos de cada esquema, em termos de precisão, eficiência computacional e facilidade na utilização, são comparados e discutidos em detalhes por Wilmoth et al. (WILMOTH et al.,) e Nance et al. (NANCE et al., 1997).

Três condições primárias devem ser consideradas quando as exigências computacionais no método DSMC são avaliadas: (1) o passo no tempo deve ser menor do que o tempo médio entre colisões, (2) as dimensões da célula devem ser menores do que o livre caminho médio local e, (3) o número de partículas por célula deve ser basicamente constante de modo a preservar a estatística no processo de colisão. A mais importante hipótese assumida no método DSMC é a de que o gás seja diluído, ou seja, o diâmetro médio molecular é muito menor do que o espaçamento médio molecular no gás. Esta hipótese permite que o movimento molecular seja desacoplado das colisões moleculares através de um pequeno intervalo de tempo local. Deste modo, uma eficiente aplicação do método exige que o passo no tempo seja uma fração do tempo médio entre colisões bem como as dimensões das células sejam da ordem de um terço do livre caminho médio local.

Com o propósito de se modelar com precisão as colisões, através de um processo estatístico, a dimensão da célula deve ser definida como sendo da ordem de um terço ou ainda menor do que o livre caminho médio local na direção em que os gradientes são mais intensos (BIRD, 1994). Próximo a superfície do corpo, o tamanho da célula na direção normal a superfície deve ser também da ordem ou menor do que um terço do livre caminho médio. Isto se deve ao fato de que em certas regiões, como por exemplo, nas vizinhanças de superfícies, as células devem ser pequenas o suficiente para que os processos físicos próximos da parede sejam capturados adequadamente. Se as dimensões das células próximas da superfície do corpo forem muito grandes, então moléculas mais energéticas próximas do bordo mais distante poderiam transferir energia e momentum para moléculas localizadas imediatamente adjacentes a superfície do corpo. Além disso, tais moléculas, adjacentes a superfície, poderiam transferir energia e momentum para a própria superfície do corpo. Este comportamento conduziria a um prognóstico errado do fluxo de calor e das forças aerodinâmicas agindo sobre a superfície do corpo. Este tipo de erro pode ser minimizado com a redução da dimensão da célula relativa ao livre caminho médio local das moléculas próximas a superfície. Dentro do campo de escoamento, os pontos da malha devem ser próximos uns dos outros nas regiões onde as propriedades físicas variam rapidamente. As células devem ser menores nas regiões onde a massa específica é grande de modo a limitar não somente o número de partículas em cada célula mas também o número de colisões em um determinado passo no tempo.

Com o intento de se modelar adequadamente os processos físicos de interesse, a simulação deve ser realizada com um número mínimo de moléculas em cada célula. Para que o processo estatístico das colisões seja eficiente, é desejável que se tenha de 20 a 30 moléculas em cada célula. Todavia, a manutenção desta exigência se torna difícil quando a distribuição da massa específica no domínio computacional deixa de ser uniforme. Conforme apontado por Kannenberg e Boyd (KANNENBERG; BOYD, 2000), o número de moléculas na célula varia inversamente com a massa específica. Portanto, regiões no domínio computacional onde a massa específica é alta tende a ter poucas moléculas, enquanto que regiões que apresentam baixa massa específica resultam em um grande número de moléculas. De modo a contornar esta dificuldade, i.e., grande variações no número de moléculas por células ao longo do domínio computacional, um fator de escala F_N é utilizado com o propósito de controlar a distribuição de moléculas simuladas dentro das células. F_N representa a razão entre o número de moléculas reais e o número de moléculas simuladas.

Neste contexto, o domínio computacional é dividido em um número arbitrário de regiões onde, para cada região, o passo no tempo Δt e o fator de escala F_N permanecem constantes. Todavia, ambos podem variar de região para região dentro do domínio computacional. A combinação da divisão do domínio computacional em regiões com a utilização de células com diferentes tamanhos conduz a uma substancial redução no número total de moléculas simuladas bem como a uma melhor resolução da malha nas regiões onde os gradientes são mais intensos. Como resultado dessa combinação, o tempo computacional é substancialmente reduzido. Cabe ressaltar que, apesar do passo no tempo Δt e do fator de escala F_N variarem de uma região para a outra no domínio computacional, a razão $F_N/\Delta t$ deve ser a mesma para todas as regiões de modo a conservar o "fluxo de massa" através das fronteiras das regiões no escoamento.

Finalmente, maiores detalhes sobre os requisitos computacionais relativos ao método DSMC são descritos, entre outros, em Rieffel (RIEFFEL, 1999) e Shu e Mao (SHU et al., 2005).

4.2 Geração da Malha Computacional

No presente trabalho, a geração da malha segue o mesmo princípio básico daquele apresentado por Bird (BIRD, 1999) no algoritmo DSMC denominado DS2G. Basicamente, o campo do escoamento é dividido em um número arbitrário de zonas. Cada zona definida com quatro lados. Dois lados opostos podem ser curvos ou retos (por exemplo, lados I e III na Figura 3.2) e os outros dois são obrigatoriamente retos (lados II e IV na Figura 3.2). Ao longo das fronteiras, pontos são distribuídos de forma que o número de pontos sobre cada lado oposto seja o mesmo. Em seguida, a estrutura de células é definida ligando-se os pontos correspondentes sobre cada lado por linhas retas, e dividindo cada uma dessas linhas por segmentos os quais são ligados para formar o sistema de células quadriláteras. A distribuição desses pontos pode ser controlada por diferentes funções algébricas as quais permitem a concentração de pontos em determinadas regiões onde os gradientes são mais intensos ou regiões em que um pequeno livre caminho médio é esperado. A distribuição dos pontos pode ser escolhida independentemente para cada zona.

4.3 Adaptação da Malha Computacional

O procedimento utilizado para a adaptação da malha computacional é dividido em três etapas: (1) uma malha computacional é inicialmente gerada baseada nas condições do meio não-perturbado, (2) valores do fator de escala F_N são definidos para cada região, e o passo no tempo Δt é estimado sujeito a condição de que a razão $F_N/\Delta t$ seja a mesma para todas as regiões, (3) estes parâmetros são iterativamente modificados até que um número aceitável de moléculas simuladas, as dimensões das células e o passo no tempo sejam obtidos.

4.4 Caso Teste

Conforme definido anteriormente no Capítulo 3, o impacto de um degrau, presente na superfície de um veículo hipersônico, na estrutura do escoamento seria melhor entendido caso a estrutura do escoamento fosse comparada com aquela em uma placa plana livre de imperfeições, i.e., sem degraus. Uma placa plana livre de imperfeições seria então investigada para servir de referência para os casos com degraus. Neste cenário, o problema de um escoamento hipersônico rarefeito sobre uma placa plana foi escolhido para validar a versão bidimensional do código DSMC utilizado neste trabalho. Em função de sua simplicidade geométrica, a placa plana é considerada como um dos casos teste mais úteis para a verificação e validação do método DSMC através de comparações com experimentos. Esse modelo de placa plana é normalmente escolhido em função da disponibilidade de dados experimentais (BECKER et al., 1974) bem como de simulações numéricas (CERCIGNANI; FREZZOTTI, 1989; HER-MINA, 1989; HURLBUT, 1989b; LORD, 1994) encontrados na literatura. Portanto, uma placa plana com as características daquela investigada experimentalmente por Becker et al. (BECKER et al., 1974) foi adotada neste trabalho como caso teste.

De acordo com Becker et al. (BECKER et al., 1974), uma placa plana de 50,8 mm de comprimento, 25,4 mm de largura e bordo de ataque com espessura de 0,04 mm foi posicionada na linha de centro de um jato de gás hélio. O campo de escoamento foi gerado pela expansão de um jato livre de uma distância da placa plana que resultou em um meio não-perturbado com um número de Mach de 8,9, temperatura de 10,7 K e pressão de 0,3379 N/m^2 . A temperatura T_w da placa foi de 290 K. A Tabela 4.1 apresenta as principais propriedades do meio não-perturbado.

Baseado nas propriedades listadas na Tabela 4.1, o número de Knudsen Kn_{∞} é de 0,0253, e o número de Reynolds Re_{∞} é de 71,3, considerando-se o comprimento da placa plana como o comprimento característico.

Propriedades	Valor	Unidade(SI)
Velocidade (U_{∞})	1723	m/s
Temperatura (T_{∞})	10,7	К
Pressão (p_{∞})	$0,\!3379$	N/m^2
Massa específica (ρ_{∞})	$1,520 \mathrm{x} 10^{-5}$	kg/m^3
Concentração de moléculas ² (n_{∞})	$2,285 \text{x} 10^{21}$	m^{-3}
Viscosidade (μ_{∞})	$1,865 \mathrm{x} 10^{-5}$	Ns/m^2
Livre caminho médio (λ_{∞})	$1,286 \mathrm{x} 10^{-3}$	m

Tabela 4.1 - Principais propriedades do meio não-perturbado.

No presente trabalho, uma placa plana, similar àquela investigada experimentalmente por Becker et al. (BECKER et al., 1974), foi assumida como estando imersa em um meio não-perturbado com o escoamento paralelo a placa. A placa plana foi modelada como uma placa sem espessura e com um comprimento de 50,8 mm, o qual

 $^{^2\}mathrm{tradução}$ adotada para a propriedade Number Density, número de moléculas por unidade de volume.

corresponde a $39\lambda_{\infty}$. A condição de contorno do meio não-perturbado foi definida a uma distância de $5\lambda_{\infty}$ a montante do bordo de ataque da placa. O domínio computacional normal a superfície da placa cobre uma distância de $30\lambda_{\infty}$ acima da placa. As simulações foram realizadas em uma malha computacional retangular similar a aquela mostrada na Figura 3.2. Desse modo, a malha computacional consiste de 50 células no lado I, sendo 42 células distribuídas na superfície da placa plana, lado I-A, e 8 células correspondente ao lado I-B, e 45 células distribuídas na direção normal a superfície da placa, i.e., lado II. Células de diferentes tamanhos foram utilizadas em ambas as direções. Esta malha computacional, de 50 X 45 células, foi denominada de malha padrão. Além desta, duas outras malhas computacionais, definidas como grosseira e fina, foram utilizadas com o propósito de se investigar o efeito da resolução da malha computacional nas simulações.

4.4.1 Efeito da Resolução da Malha Computacional

O efeito da resolução da malha sobre os resultados computacionais é de particular interesse no presente estudo. Uma resolução grosseira pode reduzir significantemente a precisão na predição das propriedades aerodinâmicas na superfície, i.e., fluxo de calor e forças aerodinâmicas agindo na superfície. Neste sentido, os coeficientes de calor, pressão e atrito são usados como parâmetros representativos no estudo da independência da malha computacional.

O efeito da variação da resolução da malha computacional é investigado para uma série de três simulações independentes com malha de 30, 50 e 70 células na direção coordenada x e 45 na direção coordenada y (veja Figura 3.2). Estas três malhas, 30 X 45, 50 X 45 e 70 X 45 células, correspondem a uma malha grosseira, padrão e fina, respectivamente. A distribuição das células nas direções coordenadas foi feita de tal forma que as dimensões das células são menores na origem e aumentam gradativamente até o final do domínio computacional. A Figura 4.1 ilustra o impacto da variação do número de células na direção coordenada x sobre os coeficientes de atrito C_f , pressão C_p e transferência de calor C_h . Conforme mostrados na Figura 4.1, os coeficientes de atrito, pressão e transferência de calor não foram afetados pela variação no tamanho das células para as malhas definidas com 50 X 45 e 70 X 45 células, i.e., malhas padrão e fina, respectivamente.

Um exame análogo foi feito para a direção coordenada y. Uma nova série de três simulações independentes com malhas de 50 células na direção coordenada $x \in 30$,

45 e 60 células na direção coordenada y. De modo similar, estas três malhas, 50 X 30, 50 X 45 e 50 X 60 células, correspondem a uma malha grosseira, padrão e fina, respectivamente. A distribuição das células nas direções coordenadas foi feita também de tal forma que as dimensões das células são menores na origem e aumentam gradativamente até o final do domínio computacional. A influência do tamanho das células nos coeficientes de atrito, pressão e transferência de calor é mostrada na Figura 4.2. De acordo com esta figura, os resultados para as três malhas independentes são aproximadamente os mesmos, indicando que com a malha padrão, 50 X 45 células, atingiu-se a independência da malha computacional.

4.4.2 Efeito da Variação do Número de Moléculas

Um exame similar ao utilizado na resolução da malha foi feito para o número de moléculas. A malha padrão de 50 X 45 células corresponde aproximadamente um total de 72.300 moléculas. Dois novos casos foram investigados utilizando-se a mesma malha. Os dois novos casos correspondem, na média, a 93.600 e 107.000 moléculas em todo o domínio computacional. O efeito nos resultados dos coeficientes de transferência de calor, pressão e atrito devido a variações no número de moléculas é mostrado na Figura 4.3. Baseado na figura, observa-se que os resultados são basicamente os mesmos para os três casos, indicando que a malha padrão, com um total de 72.300 moléculas, é adequada para computar as propriedades do escoamento.

4.4.3 Efeito da Condição de Contorno a Jusante

Conforme mencionado no Capítulo 3, vácuo foi definido como sendo a condição de contorno referente ao lado IV (vide Figura 3.2) do domínio computacional. A opção por vácuo é normalmente utilizada quando a velocidade do gás através da fronteira é supersônica. Para escoamento com número de Mach igual ou maior que três (BIRD, 1994), o fluxo de moléculas atravessando a fronteira para dentro do domínio computacional pode ser desprezada. Todavia, o efeito a montante no escoamento, devido a aplicação desta condição de contorno, pode ser estimado aumentando-se o comprimento do corpo. De modo a se determinar a extensão da região de interferência, duas outras placas com comprimentos diferentes foram investigadas. A Figura 4.4 apresenta uma comparação das propriedades aerodinâmicas na superfície calculadas para placas planas com $34\lambda_{\infty}$, $39\lambda_{\infty} e 60\lambda_{\infty}$, as quais correspondem a uma placa curta, padrão e longa, respectivamente.



Figura 4.1 - Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada x nos coeficientes de (a) atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor.


Figura 4.2 - Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada y nos coeficientes de (a) atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor.



Figura 4.3 - Efeito da alteração do número de moléculas, nos coeficientes de (a) atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor.



Figura 4.4 - Efeito da variação do comprimento da placa plana nos coeficientes de (a) atrito, (b) pressão e (c) transferência de calor.

De acordo a Figura 4.4, a condição de contorno imposta claramente afeta diferentemente as propriedades aerodinâmicas na superfície da placa. O maior efeito ocorre no coeficiente de pressão, seguido do coeficiente de transferência de calor e atrito.

4.4.4 Comparação com Experimental e Numérico

Esta subseção apresenta as comparações com dados experimentais bem como com uma série de dados provenientes de simulações numéricas sobre uma placa plana. Basicamente, o propósito é mostrar a capacidade do algoritmo DSMC, adotado neste estudo, na solução de problemas envolvendo escoamento hipersônico rarefeito. Considerando-se que tais dados estão disponíveis na literatura, os detalhes serão limitados ao mínimo necessário e as discussões restritas as conclusões mais significantes. Neste conjunto de gráficos, nas Figuras 4.5, 4.6 e 4.7, Y representa a distância y normalizada pelo livre caminho médio λ_{∞} .

A Figura 4.5 apresenta uma série de gráficos para a distribuição de massa específica normal a superfície da placa plana. Cada gráfico ilustra o perfil da massa específica ρ , normalizada pela massa específica do meio não-perturbado ρ_{∞} , para várias seções ao longo da placa plana entre a faixa de 0,5 a 31,5 mm. A dependência da massa específica com a posição axial foi medida para somente três valores da coordenada y, i.e., y = 1,25, 2,5 e 5,0 mm. Detalhes do teste experimental são apresentados por Becker at al. (BECKER et al., 1974). Os dados mostrados provenientes de simulação numérica foram obtidos por Hermina (HERMINA, 1989), através do método DSMC, e por Cercignani e Frezzoti (CERCIGNANI; FREZZOTTI, 1989) por meio da equação de Boltzmann.

De acordo com a Figura 4.5, observa-se claramente que existe uma boa concordância entre os dados da presente simulação e os dados experimentais e numéricos próximos do bordo de ataque da placa plana. Entretanto, próximo do bordo de fuga, uma significante discordância é observada entre os dados da presente simulação e aqueles obtidos experimentalmente.

A Figura 4.6 ilustra a variação na velocidade tangencial u, normalizada pela velocidade do meio não-perturbado U_{∞} , correspondente as seções mostradas anteriormente. Conforme mostrado nesta figura, para $Y \cong 0$, a velocidade tangencial é diferente de zero. Apresenta um grande valor próximo do bordo de ataque e diminui ao longo da placa plana devido ao aumento no número de colisões com a superfície da placa. Portanto, a condição de velocidade "no-slip" não se aplica. A comparação dos resultados mostra que nas vizinhanças do bordo de ataque os valores para as velocidades computadas são ligeiramente maiores do que aqueles medidos. Em contrapartida, a medida que o bordo de fuga se aproxima, os valores computados se tornam menores do que aqueles obtidos experimentalmente. De acordo com Hermina (HERMINA, 1989), este comportamento indica que o coeficiente de acomodação utilizado nas simulações é muito menor próximo ao bordo de ataque e muito maior para posições próximas do bordo de fuga. Em contraste com os perfis de massa específica, os perfis de velocidade obtidos na presente simulação apresentam uma boa concordância quando comparado com os outros resultados simulados.

De modo análogo, variações nos perfis de temperatura T, normalizados pela temperatura do meio não-perturbado T_{∞} , são demonstradas na Figura 4.7. Conclui-se desta figura que existe um "jump" na temperatura, i.e., próximo a superfície da placa, $Y \cong 0$, a temperatura T difere da temperatura da placa T_w . A razão de temperatura T/T_w é aproximadamente igual a $(T/T_{\infty})/29$. Portanto, a temperatura nas vizinhanças da superfície da placa atinge a temperatura da placa próximo do bordo de fuga. Novamente, em contraste com os perfis de massa específica, os perfis de temperatura apresentam uma boa concordância quando comparado com aqueles obtidos experimentalmente e numericamente.

As Figuras 4.5, 4.6 e 4.7 apresentaram os perfis de massa específica, velocidade e temperatura, respectivamente, na direção normal a superfície da placa plana para determinadas seções ao longo da placa. De modo análogo, as Figuras 4.8, 4.9 e 4.10 exibem as variações longitudinais destas propriedades para determinadas distâncias acima da placa plana. Nestas figuras X representa a distância x normalizada pelo livre caminho médio λ_{∞} . A Figura 4.8 apresenta a variação da massa específica ρ/ρ_{∞} para uma distância de 1,25 mm acima da superfície da placa plana. Como definido anteriormente, a linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam dados experimentais e numéricos, respectivamente. De acordo com a Figura 4.8, uma boa concordância é observada entre os dados da presente simulação e aqueles apresentados por Lord (LORD, 1994). Entretanto, ambas as soluções se afastam dos resultados experimentais na direção do bordo de fuga. Cabe ressaltar que Lord (LORD, 1994) analisou o mesmo problema através do método DSMC. Na análise, o efeito da interação gás-superfície na estrutura do escoamento foi investigada assumindo-se que as moléculas refletiam da superfície da placa de



Figura 4.5 - Perfis de massa específica (ρ/ρ_{∞}) normal a superfície para várias seções ao longo da placa plana. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.



Figura 4.6 - Perfis de velocidade tangencial (u/U_{∞}) a superfície para várias seções ao longo da placa plana. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.



Figura 4.7 - Perfis de temperatura (T/T_{∞}) normal a superfície para várias seções ao longo da placa plana. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.



Figura 4.8 - Perfis de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície da placa plana para y = 1,25 mm. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.

acordo com o modelo de Cercignani-Lampis-Lord (CLL) (LORD, 1991).

A distribuição da velocidade tangencial u/U_{∞} ao longo da placa plana para uma distância de 1,25 mm acima da superfície da placa é ilustrada na Figura 4.9. Desta figura, observa-se que existe uma boa concordância entre os dados numéricos. No entanto, a comparação com os dados experimentais mostra que as velocidades obtidas através de simulações diminuem mais rapidamente ao longo da placa.

Finalmente, a Figura 4.10 exibe a variação da temperatura do gás T/T_{∞} ao longo da placa plana correspondente a seção y = 1,25 mm. Conforme mostrado na figura, uma boa concordância é observada entre os dados experimentais e os dados obtidos através de simulação numérica, exceto para aqueles apresentados por Hurlbut (HURLBUT, 1989a). Apesar da significante diferença entre os resultados computacionais, Hurlbut (HURLBUT, 1989a) e Lord (LORD, 1994) utilizaram a mesma estrutura de células.

Comparações entre dados experimentais e dados provenientes de simulações numéricas foram feitas para o escoamento hipersônico de gás Hélio sobre uma placa plana. De modo geral, da avaliação dos resultados, conclui-se que a concordância com os dados experimentais é muito boa próximo do bordo de ataque e não muito boa próximo



Figura 4.9 - Perfis de velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície da placa plana para y = 1,25 mm. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.



Figura 4.10 - Perfis de temperatura (T/T_{∞}) ao longo da superfície da placa plana para y = 1,25 mm. Linha cheia representa a presente simulação, e símbolos cheios e vazios representam, respectivamente, dados experimentais e numéricos.

do bordo de fuga da placa plana. Caso a discordância fosse atribuída aos métodos computacionais, poder-se-ia, a princípio, atribuí-la a um modelo inadequado para

a interação gás-superfície. Esta hipótese poderia ser corroborada pelos resultados apresentados por Hermina (HERMINA, 1989), Hurlbut (HURLBUT, 1989a), e Cercignani e Frezzotti (CERCIGNANI; FREZZOTTI, 1989), os quais mostraram uma melhor concordância quando acomodação incompleta na superfície foi considerada. Todavia, comparações levando-se em conta resultados com acomodação incompleta na superfície estão fora do escopo do presente processo de validação, restrito apenas a acomodação completa na superfície.

No que concerne às comparações, as conclusões definitivas devem ser feitas com cautela, considerando-se que cada simulação difere uma das outras em algumas características. Por exemplo, Hermina (HERMINA, 1989) considerou um escoamento divergente de gás Hélio sobre a placa plana. De modo similar ao modelo experimental, considerou, também, a espessura do bordo de ataque bem como a inclinação da superfície inferior da placa. Cercignani e Frezzotti (CERCIGNANI; FREZZOTTI, 1989) assumiram que a placa plana estava posicionada a frente de um jato axissimétrico originado de um orifício sônico. A interação entre o jato axissimétrico e a placa plana não foi tratada corretamente uma vez que, um escoamento com características 3-D foi modelado como sendo um escoamento 2-D. Neste cenário, supõe-se que o campo de escoamento seja afetado pela divergência do jato. Por último, uma corrente livre uniforme escoando paralela a placa plana, ao invés de um jato divergente, foi assumido como condição de contorno na presente simulação bem como nas simulações DSMC realizadas por Hurlbult (HURLBUT, 1989a) e Lord (LORD, 1994).

4.5 Caso Degrau com face a Montante

O procedimento adotado para o escoamento hipersônico sobre a placa plana do caso teste, descrito nas seções anteriores, foi também aplicado aos degraus com faces a montante e a jusante definidos no Capítulo 3. As simulações foram realizadas com malhas computacionais que atendem as exigências do método DSMC já discutidas nas seções 4.1 a 4.3. Conforme discutido, a dimensão da célula é mais crítica na direção onde os gradientes são mais intensos. Para os degraus, os gradientes são importantes na direção normal à superfície e nas vizinhanças do degrau propriamente dito. Com relação ao degrau com face a montante, as simulações foram realizadas com malhas computacionais contendo 200 células distribuídas na direção coordenada x (veja Figura 3.2), i.e., 190 células no lado I-A e 10 células no lado I-B. O número de células correspondente a direção coordenada y foi de 55, 65 e 100 para degraus com altura h de 3, 6 e 9 mm, respectivamente. Estas células foram distribuídas no



Figura 4.11 - Malha computacional padrão para o degrau com face a montante com h = 3 mm.

lado III bem como no lado IV, sendo que 10, 20 e 30 células foram definidas nas faces dos degraus de 3, 6 e 9 mm de altura, respectivamente. Cada malha computacional foi construída de modo que as dimensões das células fossem não-uniformes em ambas as direções coordenadas. De modo análogo, para o degrau com face a jusante, as simulações foram realizadas com malhas computacionais contendo 310 células na direção coordenada x, sendo 300 no lado I-A e 10 no lado I-B. Na direção coordenada y, 140, 160 e 180 células foram utilizadas para degraus com altura h de 3, 6 e 9 mm, respectivamente. Para os degraus com face a jusante, 20, 30 e 40 células foram definidas nas faces dos degraus de 3, 6 e 9 mm de altura, respectivamente.

A título de ilustração, a Figura 4.11 exibe a malha computacional padrão, 200 x 55 células, para o degrau a montante com h = 3 mm. Para o mesmo degrau, a Figura 4.12 ilustra o efeito da variação da resolução na malha na direção coordenada x sobre as propriedades aerodinâmicas na superfície, i.e., nos coeficientes de atrito, pressão e transferência de calor. O efeito correspondente na direção coordenada y é mostrado na Figura 4.13. Finalmente, o efeito no número de moléculas é apresentado na Figura 4.14. Neste grupo de gráficos, $X \in Y$ representam a distância $x \in y$, ambas normalizadas pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} .



Figura 4.12 - Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada x nos coeficientes de atrito (acima), pressão (meio) e transferência de calor (abaixo) para degrau com face a montante com h = 3 mm.



Figura 4.13 - Efeito da variação do tamanho das células na direção coordenada y nos coeficientes de atrito (acima), pressão (meio) e transferência de calor (abaixo) para degrau com face a montante com h = 3 mm.



Figura 4.14 - Efeito da variação do número de moléculas nos coeficientes de atrito (acima), pressão (meio) e transferência de calor (abaixo) para degrau com face a montante com h = 3 mm.

5 RESULTADOS COMPUTACIONAIS

Este capítulo foca nos efeitos na estrutura do escoamento e nas propriedades aerodinâmicas na superfície devido a variação na altura dos degraus com face a montante e a jusante. Neste trabalho, define-se por estrutura do escoamento a distribuição das propriedades primárias (macroscópicas), tais como, velocidade, massa específica, pressão e temperatura, no domínio computacional. Denota-se por propriedades aerodinâmicas na superfície o fluxo de moléculas, o fluxo de calor, a pressão e a tensão tangencial. Neste contexto, este capítulo compara e discute as diferenças nestas quantidades, expressas na forma de coeficientes, em função da variação na altura dos degraus. Sempre que possível, comparações quantitativas e qualitativas com degraus em escoamentos rarefeito e no contínuo serão apresentadas e discutidas.

5.1 Estruturas do Escoamento

Duas quantidades fundamentais na dinâmica de gases são velocidade e concentração de moléculas. Estas quantidades não são dependentes nem derivadas da condição de equilíbrio térmico, como é o caso para temperatura e pressão. A diferença na descrição de escoamento em equilíbrio e escoamento em não-equilíbrio resulta das diferenças no comportamento termodinâmico do gás; o aspecto dinâmico se mantém o mesmo. Então, primeiro será dada atenção a velocidade e massa específica, seguidos de pressão e temperatura.

5.1.1 Degrau com face a Montante

5.1.1.1 Campo de Velocidade

O método DSMC é um método essencialmente estatístico. Assim sendo, as propriedades macroscópicas são computadas como médias a partir das propriedades microscópicas em cada célula no domínio computacional. Como resultado, a velocidade é dada pela seguinte expressão,

$$c_{0} = \frac{\sum_{j=1}^{N} m_{j} \mathbf{c}_{j}}{\sum_{j=1}^{N} m_{j}}$$
(5.1)

onde N, $m \in \mathbf{c}_i$ representam, respectivamente, o número de moléculas, a massa e as



Figura 5.1 - Comportamento da camada limite ao longo da placa plana.

componentes das velocidades das moléculas em cada célula.

Cabe ressaltar que a velocidade média molecular $\bar{\mathbf{c}} (\equiv \mathbf{c}_0 \equiv \mathbf{u} \vec{i} + \mathbf{v} \vec{j} + \mathbf{w} \vec{k})$ define a velocidade média macroscópica. A velocidade da molécula relativa a velocidade média macroscópica, definida como velocidade térmica ou peculiar, é denotada por $\mathbf{c}^2 \equiv \mathbf{c} - \mathbf{c}_0$.

Antes da análise dos perfis de velocidade ao longo dos degraus, torna-se importante apresentar a espessura da camada limite δ sobre a placa plana livre de imperfeições, utilizada como referência na investigação da influência dos degraus. O bordo da camada limite foi obtido considerando-se os pontos onde a velocidade tangencial usobre a placa plana atingisse o valor $0, 99U_{\infty}$. Como resultado, a Figura 5.1 apresenta o comportamento da camada limite para diferentes seções ao longo da placa plana longe do bordo de ataque. Nesta figura, δ , $x \in Re_x$ representam, respectivamente, a espessura da camada limite, a distância ao longo da placa plana e o número de Reynolds baseado em x.

De acordo com a Tabela 3.1, os degraus foram posicionados a uma distância de $50\lambda_{\infty}$ do bordo de ataque da placa plana. Assim sendo, a espessura da camada limite para esta seção corresponde é $\delta = 15,44$ mm. Conseqüentemente, a espessura da camada limite é maior do que a altura dos degraus investigados, um dos focos do presente trabalho, conforme descrito na introdução.

No que concerne a hipótese do contínuo, a espessura δ/x da camada limite laminar sobre uma placa plana aumenta proporcionalmente com $1/\sqrt{Re_x}$ (CURRIE, 1993). Todavia, para a placa plana mostrada na Figura 5.1, a espessura da camada limite aumenta proporcionalmente a $1/Re_x^{0,410215}$, i.e., uma indicação de que a camada limite para um escoamento rarefeito é mais espessa do que aquela em um escoamento no regime do contínuo.

A distribuição da velocidade tangencial u/U_{∞} para seis seções ao longo da superfície inferior do degrau é ilustrada na Figura 5.2 como função da altura h do degrau. Neste conjunto de gráficos, X representa a distância x normalizada pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} , e Y a distância y acima da superfície inferior também normalizada por λ_{∞} . Como base de comparação, o perfil de velocidade para a placa plana também foi apresentado nos mesmos gráficos.

Importantes características podem ser observadas nos perfis de velocidade tangencial mostrados na Figura 5.2. Para as seções $X \leq 30$, os perfis de velocidade para os casos com degraus são idênticos aqueles para a placa plana, i.e., nenhum efeito da presença do degrau é observado. Todavia, para as seções $X \geq 40$, observa-se o efeito da presença do degrau nos perfis de velocidade. Importa esclarecer que os degraus estão posicionados em X = 50. Além disto, a medida que se aumenta a altura h do degrau, os perfis de velocidade são afetados mais a montante. Este comportamento resulta da difusão das moléculas que são refletidas da face do degrau. Portanto, aumentando-se o número de Reynolds, Re_h , aumenta-se o efeito a montante nos perfis de velocidade tangencial. Outrossim, para as seções $X \geq 40$, os perfis de velocidade relacionados com os degraus indicam velocidades negativas (backflow) próximo a superfície inferior, caracterizando uma região de recirculação a frente dos degraus. Este tipo de comportamento no escoamento rarefeito, i.e., a presença de uma região de recirculação a frente do degrau, também ocorre em um escoamento no contínuo, conforme esquematizado na Figura 1.3.

Outra peculiaridade do escoamento diz respeito a intensidade da velocidade para $Y \approx 0$, ou seja, a velocidade ao longo da superfície da placa plana bem como ao longo da superfície inferior do degrau para seções longe do degrau. Vê-se claramente que $u/U_{\infty} \neq 0$ para $Y \approx 0$, uma característica de escoamento rarefeito. Como resultado, a condição de $u/U_{\infty} = 0$ na parede (no-slip velocity) não se aplica em escoamento

rarefeito.

De modo análogo, a Figura 5.3 apresenta a distribuição da velocidade tangencial u/U_{∞} para seis seções ao longo da superfície superior como função da altura h do degrau. Neste grupo de gráficos, X representa a distância x normalizada por λ_{∞} , e Y' a distância y - h, acima da superfície superior normalizada por λ_{∞} . Novamente, a título de comparação, o perfil de velocidade para a placa plana também foi apresentado correspondentemente as seis seções. De acordo com este grupo de gráficos, observa-se que, nas vizinhanças da superfície, os perfis de velocidade para os casos com degrau são similares aqueles para a placa plana. Embora em menor intensidade, ambos – degrau e placa plana – ainda apresentam $u/U_{\infty} \neq 0$ para $Y' \approx 0$, i.e., ainda existe uma velocidade de "escorregamento". Observa-se, também, que a presença do degrau afeta o escoamento a grandes distâncias na direção perpendicular a superfície superior. Como esperado, este efeito aumenta como o aumento da altura h do degrau. Outra particularidade do escoamento diz respeito a inexistência de velocidades negativas (backflow) nos perfis de velocidade na superfície superior dos degraus; uma indicação de que não há regiões de recirculação na superfície superior dos degraus, para as condições investigadas no presente trabalho. Este comportamento difere daquele normalmente encontrado em escoamentos sobre degraus no regime do contínuo, onde regiões de recirculação geralmente aparecem na superfície superior (CAMUSSI et al., 2008).

Com o propósito de enfatizar importantes características na estrutura do escoamento, linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus são apresentadas na Figura 5.4. Neste conjunto de gráficos, Y_h representa a distância vertical y normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau. Neste contexto, a origem foi deslocada para o início do degrau. De acordo com a Figura 5.4, nota-se claramente que, para as condições investigadas no presente trabalho, surge uma região de recirculação a frente dos degraus. Em contrapartida, recirculação na parte superior dos degraus não é observada. Estas observações já haviam sido indicadas nos perfis de velocidade mostrados anteriormente.

Outras importantes características podem ser obtidas a partir de um exame mais detalhado da Figura 5.4. Para o caso h = 3 mm, as linhas de correntes são paralelas a superfície inferior para a seção X'_h = - 4.0. Uma indicação de que o escoamento para $X'_h \leq -4.0$ ainda não tem conhecimento da presença do degrau a frente. Em



Figura 5.2 - Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a montante como função da altura *h*.



Figura 5.3 - Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a montante como função da altura *h*.



Figura 5.4 - Distribuição de linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus com altura h de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

contraste, para os casos h = 6 mm e 9 mm, as linhas de correntes são inclinadas em relação a superfície inferior para a mesma seção; uma indicação de que o escoamento já tem conhecimento da presença do degrau a frente. Essa informação é enviada a montante por meio das colisões das moléculas. Observa-se que a região de recirculação aumenta com o aumento da altura h do degrau, ou com o número de Reynolds Re_h , não somente ao longo da superfície inferior bem como ao longo da face do degrau. Este comportamento difere daquele observado em um escoamento no contínuo. Através de uma investigação experimental, Camussi et al. (CAMUSSI et al., 2008) concluíram que a região de separação ocorre independentemente de Re_h ; da ordem de um h a montante do degrau e de aproximadamente $\frac{1}{2}$ h na face do degrau. Observase, também, que, após a separação na superfície inferior, o escoamento volta a aderir a superfície do degrau, i.e., na face do degrau próximo da quina. Para o presente trabalho, o ponto de separação x_s e o ponto de aderência y_r na face do degrau foram obtidos para a condição de $\tau_w = 0$ (ou $C_f = 0$), considerando-se reflexão difusa. A Tabela 5.1 apresenta x_s e y_r como função da altura do degrau. Nesta tabela, X_s e X_{sh} representam o ponto x_s normalizado pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} e pela altura h, respectivamente, X_{sh}^\prime corresponde a x_s-D normalizado pela altura h e, de modo similar, Y_r e Y_{rh} o ponto y_r normalizado por λ_{∞} e h, respectivamente.

Tabela 5.1 - Ponto de separação e aderência do escoamento.

h	X_s	X_{sh}	X'_{sh}	Y_r	Y_{rh}
3 mm	48,33	14,96	-0,52	2,64	0,82
$6 \mathrm{mm}$	42,87	$6,\!63$	-1,10	$5,\!62$	$0,\!87$
$9 \mathrm{mm}$	$37,\!34$	$3,\!85$	-1,31	8,70	$0,\!90$

Antes de se prosseguir com a análise dos perfis de massa específica, é desejável ilustrar a distribuição da intensidade do vetor velocidade $|\vec{V}|$, normalizado pela velocidade do meio não-perturbado U_{∞} , nas vizinhanças dos degraus. A Figura 5.5 apresenta esta grandeza juntamente com linhas de corrente. Nesta figura, Y_h representa a distância vertical y normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau.



Figura 5.5 - Distribuição da intensidade do vetor velocidade $(|\vec{V}|/U_{\infty})$ nas vizinhanças do degrau com altura *h* de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

5.1.1.2 Campo de Massa Específica

A massa específica em cada célula no domínio computacional é obtida através da seguinte expressão,

$$\bar{\rho} = \frac{1}{V_c} \sum_{j}^{N} m_j \tag{5.2}$$

onde N é o número de moléculas na célula, m a massa das moléculas e V_c o volume da célula.

A distribuição de massa específica ρ/ρ_{∞} ao longo da superfície inferior do degrau é ilustrada na Figura 5.6 como função da altura h do degrau. Similar a distribuição de velocidade tangencial, a distribuição de massa específica é apresentada nesta figura para seis seções definidas por X = 10, 20, 30, 40, 45 e 48. Novamente, X representa a distância x normalizada pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} , e Y a distância y acima da superfície inferior também normalizada por λ_{∞} . Como base de comparação, o perfil de massa específica para a placa plana também foi apresentado nos mesmos diagramas. Face a grande variação da razão ρ/ρ_{∞} ao longo da superfície inferior do degrau, a escala na direção coordenada x difere em alguns diagramas.

De acordo com a Figura 5.6, observa-se que os perfis de massa específica para os degraus seguem o mesmo comportamento daquele para a placa plana até aproximadamente a metade da superfície inferior. Para a seção X = 30, o efeito da presença do degrau com h = 9 mm no escoamento já é sentido na massa específica. O perfil para o degrau já difere daquele da placa plana nas vizinhanças da parede. Em contrapartida, na seção X = 40, a presença do degrau com h = 3 mm ainda não foi percebida pela massa específica. Como esperado, a medida que se aumenta a altura h do degrau, a influência do degrau é sentida mais a montante no escoamento.

Outra característica marcante diz respeito a magnitude da massa específica a medida que o escoamento se aproxima do degrau. Vê-se claramente que a massa específica ρ aumentou uma ordem de grandeza quando comparada com a massa específica ρ_{∞} do meio não-perturbado. Este aumento na massa específica, nas vizinhanças da face do degrau, é uma característica observável em escoamentos ao redor de corpos rombudos na reentrada atmosférica, denominada como característica de "escoamento de parede fria" (cold-wall flow). Normalmente, em escoamento na reentrada, a temperatura da parede T_w é baixa quando comparada com a temperatura de estagnação T_o . Para a presente simulação, a razão T_w/T_o é de 0,032.

Ainda de acordo com a Figura 5.6, pode ser visto que a massa específica apresenta significantes mudanças na direção perpendicular a superfície inferior do degrau. Na direção perpendicular a superfície, a massa específica apresenta um grande valor, quando comparada com a massa específica do meio não-perturbado. A medida que Y aumenta a massa específica diminui rapidamente dentro de uma camada da ordem de um livre caminho médio molecular λ_{∞} . Em seguida, a massa específica exibe um novo aumento devido a onda de choque e, finalmente, diminui atingindo o valor da massa específica do meio não-perturbado para grandes valores de Y. Este comportamento é normalmente observado quando a temperatura da superfície do corpo é muito mais baixa do que a temperatura de estagnação do gás proveniente do meio não-perturbado. Como resultado, o gás próximo da parede tende a ser muito mais denso e frio do que o gás no restante da camada limite.

A distribuição de massa específica ρ/ρ_{∞} para seis seções ao longo da superfície superior do degrau é demonstrada na Figura 5.7 como função da altura h do degrau. Cabe ressaltar que, neste grupo de gráficos, X e Y são distâncias normalizadas conforme apresentadas anteriormente por ocasião da distribuição de velocidade tangencial. Baseado na Figura 5.7, nota-se que a distribuição de massa específica ao longo da superfície superior apresenta importantes características. A razão de massa específica apresenta grandes mudanças a medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície superior. Os maiores valores para a massa específica ocorrem nas vizinhanças da quina do degrau. Nota-se que quanto maior a altura h do degrau, maior a razão de massa específica. Ao longo da superfície, a razão de massa específica diminui razoavelmente e indica atingir o perfil apresentado para a placa plana longe da quina do degrau. Na direção perpendicular a superfície, o comportamento da distribuição da massa específica é similar aquele observado na superfície inferior. Outra característica importante diz respeito aos perfis de massa específica para a placa plana. Conforme mostrado, a massa específica ρ é relativamente alta adjacente a superfície e alta no interior da onda de choque.

Entretanto, entre a parede e a onda de choque, existe uma região onde a razão $\rho/\rho_{\infty} < 1$, i.e., a massa específica ρ é menor do que a massa específica do meio não-



Figura 5.6 - Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a montante como função da altura *h*.



Figura 5.7 - Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a montante como função da altura h.

perturbado. Este comportamento se deve ao fato de que nessa região, entre a parede e a onda de choque, a temperatura do escoamento é maior do que aquela adjacente a parede e aquela no interior da onda de choque. O campo de temperatura será apresentado subseqüentemente.

Uma segunda etapa na investigação do comportamento da massa específica diz respeito ao efeito a montante devido a presença do degrau no escoamento. Um exame mais cuidadoso foi realizado com o propósito de se estimar a extensão deste efeito. Para a primeira fileira de células adjacentes a superfície inferior, calculou-se a diferença na massa específica obtida para os dois casos, i.e., entre o caso com degrau e o caso sem degrau; o caso da placa plana. Neste cenário, $\Delta \rho_x$ denota o aumento na massa específica, devido a presença do degrau, em função da coordenada x. A Figura 5.8 ilustra a extensão deste efeito ao longo da superfície inferior. Neste grupo de gráficos, a diferença na massa específica $\Delta \rho_x$ é normalizada pela massa específica do meio não-perturbado ρ_{∞} . A título de ilustração, a extensão da perturbação a montante foi normalizada tanto pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} como pela altura h do degrau.

De acordo com a Figura 5.8, observa-se que a presença do degrau causa um aumento significativo na massa específica nas vizinhanças do degrau. Observa-se, também, que $\Delta \rho_x / \rho_\infty$ aumenta de modo contínuo até a face do degrau para o caso h = 3 mm. Em contrapartida, para os casos h = 6 e 9 mm, o aumento de $\Delta \rho_x / \rho_\infty$ deixa de ser contínuo, a taxa de crescimento diminui a ponto de se formar um platô bem definido para o caso h = 9 mm. Levando-se em conta a posição em que o platô ocorre, tudo indica que ele esteja associado com a região de recirculação.

Continuando com a Figura 5.8, nota-se que a região afetada pela presença do degrau é função da altura h do degrau. Considerando-se $\Delta \rho_x / \rho_{\infty} = 0.05$ como condição limite onde a diferença passa a ser apreciável, tem-se que o impacto do degrau propaga-se a montante até uma determinada posição, X_0 , definida como ponto de interação. Neste contexto, para h de 3, 6 e 9 mm, obtem-se para X_0 os valores de 38,12, 32,27 e 28,05, respectivamente. Assumindo-se a seção em que o degrau está localizado como referência, estima-se que a extensão da região perturbada corresponde a X'_{0h} = -3,68, -2,74 e -2,26 para h de 3, 6 e 9 mm, respectivamente. A diferença entre o ponto de separação, X_s , e o ponto de interação, X_0 , determina a região de préseparação, definida aqui por X_{ps} . A região de pré-separação define a distância antes da separação em que uma determinada propriedade macroscópica já demonstra ser



Figura 5.8 - Efeito a montante da influência do degrau na distribuição de massa específica ρ adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada x normalizada por λ_{∞} e (b) por h.

afetada pela presença do degrau no escoamento. De modo similar, X'_{ps} a região de separação para o sistema de referência posicionado no degrau. A Tabela 5.2 sintetiza os pontos de interação e as regiões de pré-separação para a massa específica.

Finalmente, torna-se desejável ilustrar mapas de contorno da massa específica ρ , nas vizinhanças dos degraus. A Figura 5.9 apresenta mapas com a distribuição da massa específica juntamente com linhas de corrente. Nesta figura, Y_h representa a distância vertical y normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau.

h	X_s	X_0	X_{ps}	X'_{sh}	X'_{0h}	X'_{ps}
$3 \mathrm{mm}$	48,33	38,12	10,21	-0,52	- 3,68	3,16
$6 \mathrm{mm}$	42,87	$32,\!27$	10,60	-1,10	- 2,74	1,64
$9 \mathrm{mm}$	37,34	$28,\!05$	$9,\!29$	-1,31	- 2,26	0,95

Tabela 5.2 - Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a massa específica.



Figura 5.9 - Distribuição da massa específica (ρ/ρ_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura *h* de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

5.1.1.3 Campo de Pressão

A pressão em cada célula no domínio computacional é obtida através da seguinte expressão,

$$\bar{p} = \frac{1}{3V_c} \sum_{j=1}^{N} \frac{(mc^2)_j}{N}$$
(5.3)

onde N é o número de moléculas na célula, m a massa das molécula, c' a velocidade térmica da molécula e V_c o volume da célula.

A distribuição de pressão ao longo da superfície inferior do degrau é mostrada na Figura 5.10 como função da altura h do degrau. Similar a distribuição de massa específica, a distribuição de pressão é apresentada nesta figura para seis seções ao longo da superfície definidas por X = 10, 20, 30, 40, 45 e 48. Neste conjunto de gráficos, a pressão p é normalizada pela pressão p_{∞} do meio não-perturbado. Novamente, como base de comparação, o perfil de pressão para a placa plana é apresentado nos mesmos gráficos. Ademais, em função da grande variação da razão p/p_{∞} ao longo da superfície inferior do degrau, a escala na direção coordenada x difere em alguns gráficos.

Baseado na Figura 5.10, nota-se que os perfis de pressão para os degraus seguem o mesmo comportamento daqueles para a placa plana até aproximadamente a metade da superfície inferior. Para a seção X = 30, o efeito da presença do degrau com h = 9mm no escoamento já é sentido na distribuição de pressão. Similar ao comportamento observado para a massa específica, o perfil de pressão para o degrau já difere daquele da placa plana nas vizinhanças da parede, para a seção X = 30. Por outro lado, na seção X = 40, a distribuição de pressão indica não ter percebido ainda a presença do degrau com h = 3 mm. Como esperado, a medida que se aumenta a altura h do degrau, a influência do degrau é sentida mais a montante no escoamento. Nota-se, também, que a razão p/p_{∞} aumenta dramaticamente a medida que o escoamento se aproxima do degrau. Observa-se claramente que a pressão p aumentou de duas ordens de magnitude quando comparada com a pressão p_{∞} do meio não-perturbado.

A Figura 5.11 ilustra a razão de pressão p/p_{∞} para seis seções ao longo da superfície



Figura 5.10 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a montante como função da altura *h*.

superior como função da altura h do degrau. De acordo com a Figura 5.11, percebe-se que a distribuição de pressão ao longo da superfície superior apresenta características similares a aquelas apresentadas pela distribuição de massa específica. A razão de pressão apresenta grandes mudanças a medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície superior. Os maiores valores para a razão de pressão ocorrem nas vizinhanças da quina do degrau. Nota-se, também, que quanto maior a altura h do degrau, maior a razão de pressão p/p_{∞} não somente adjacente a parede mas também no interior da onda de choque. Ao longo da superfície, a razão de pressão adjacente a parede diminui significativamente e indica atingir o perfil apresentado para a placa plana longe da quina do degrau. Na direção perpendicular a superfície, o comportamento da distribuição da razão de pressão é similar aquele observado na superfície inferior.

O efeito a montante na pressão, devido a presença do degrau, foi estimado de modo similar a aquele apresentado para a massa específica. Assim sendo, para a primeira fileira de células adjacentes a superfície inferior, calculou-se a diferença na pressão obtida para os dois casos, i.e., entre o caso com degrau e o caso da placa plana. Neste contexto, Δp_x denota o aumento na pressão, devido a presença do degrau, em função da direção coordenada x. A Figura 5.12 exibe a extensão deste efeito ao longo da superfície inferior. Neste grupo de diagramas, a diferença na pressão Δp_x é normalizada pela pressão p_{∞} do meio não-perturbado. Ademais, o diagrama da esquerda representa a extensão da perturbação a montante normalizada pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} e o da direita representa a mesma distância, em relação a posição do degrau, normalizada pela altura h do degrau.

De acordo com a Figura 5.12, verifica-se que a região afetada pela presença do degrau é função da altura h do degrau. Verifica-se, também, que a presença do degrau causa um aumento significativo na pressão nas vizinhanças do degrau. Observa-se que $\Delta p_x/p_{\infty}$ atinge um valor constante, um platô, bem próximo da face do degrau. Este comportamento fica mais evidente no diagrama apresentado a direita, quando a coordenada x é normalizada pela altura h do degrau.

Importa acrescentar que a presença de um platô na pressão foi também observado por Chapmann et al. (CHAPMANN et al., 1958), que conduziram uma pesquisa teórica e experimental, no regime do contínuo, sobre a separação associada com degraus, ondas de choque incidindo sobre camada limite e outras configurações que produziram separação no escoamento.



Figura 5.11 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a montante como função da altura h.


Figura 5.12 - Efeito a montante da influência do degrau na distribuição de pressão p adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada x normalizada por λ_{∞} e (b) por h.

Em seguida, o ponto de interação X_0 e a região de pré-separação X_{ps} relacionada com a pressão podem ser obtidos como função da altura h do degrau de modo similar a aqueles obtidos para a massa específica. Neste contexto, a Tabela 5.3 resume os pontos de interação e as regiões de pré-separação para a pressão. Vale lembrar que na Tabela 5.3, X'_{0h} e X'_{ps} representam, respectivamente, o ponto de interação e a região de pré-separação, normalizados por h, para o sistema de referência posicionado no degrau.

Comparado com os dados mostrados na Tabela 5.2, referente a massa específica, conclui-se que o efeito a montante da presença do degrau na pressão é basicamente da mesma ordem daquele para a massa específica. As pequenas discrepâncias se devem a possíveis flutuações no valor para as pressões. Finalmente, torna-se imperativo exibir mapas de contorno da pressão nas vizinhanças dos degraus. A Figura 5.13 apresenta mapas com a distribuição da pressão juntamente com linhas de corrente.

h	X_s	X_0	X_{ps}	X'_{sh}	X'_{0h}	X'_{ps}
3 mm	48.33	37.83	10.50	-0,52	- 3.77	3,25

9,08

9,14

-1,10

-1,31

- 2,51

- 2,25

1,41

0,94

42,87

37,34

6 mm

9 mm

33,79

28,20

Tabela 5.3 - Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a pressão.



Figura 5.13 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura h de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

5.1.1.4 Campo de Temperatura

A forte onda de choque que se forma ao redor do degrau em um escoamento hipersônico converte parte da energia cinética das moléculas de ar do meio não-perturbado em energia térmica. Esta energia térmica na camada de choque é distribuída de modo a aumentar a energia cinética de translação das moléculas bem como excitar outros modos de energia das moléculas como rotação e vibração.

Em um gás monoatômico, a temperatura de translação, associada a energia cinética de translação das moléculas, pode ser referenciada como sendo simplesmente temperatura. Em um gás diatômico ou poliatômico, as moléculas possuem também energia interna associada com os modos internos de rotação e vibração. Para um gás em equilíbrio termodinâmico, a temperatura de translação é igual a temperatura relacionada com os modos internos e é identificada como temperatura termodinâmica. Para um gás em não-equilíbrio termodinâmico, uma temperatura global é definida em função dos graus de liberdade dos modos internos de energia como segue,

$$T_G = \frac{\left(3T_T + \zeta_R T_R + \zeta_V T_V\right)}{\left(3 + \zeta_R + \zeta_V\right)} \tag{5.4}$$

onde T e ζ representam a temperatura e o grau de liberdade, respectivamente. Os sub-índices T, R e V referem-se a translação, rotação e vibração, respectivamente. As temperaturas de translação, rotação e vibração são obtidas para cada célula no domínio computacional pelas seguintes expressões,

$$\bar{T}_T = \frac{1}{3K} \sum_{j=1}^N \frac{(mc'^2)_j}{N}$$
(5.5)

$$\bar{T}_R = \frac{2}{K} \frac{\bar{\varepsilon}_R}{\zeta_R} \tag{5.6}$$

$$\bar{T}_V = \frac{\Theta_V}{\ln(1 + \frac{K\Theta_V}{\bar{\varepsilon}_V})}$$
(5.7)

onde K é a constante de Boltzmann, Θ_V a temperatura característica de vibração e $\bar{\varepsilon}_R$ e $\bar{\varepsilon}_V$ as energias médias de rotação e vibração em cada célula.

Com o propósito de destacar importantes características no campo de temperatura, a distribuição de temperatura para duas seções ao longo da superfície inferior do degrau é ilustrada na Figura 5.14 como função da altura h do degrau. Nesta figura, o gráfico (a) corresponde a uma seção longe do degrau, X = 10, e (b) uma seção nas vizinhanças do degrau, X = 48. A razão de temperatura representa as temperaturas de translação T_T , de rotação T_R , de vibração T_V e a global T_G normalizadas pela temperatura T_{∞} do meio não-perturbado. Além disso, símbolos cheios e vazios correspondem, respectivamente, aos degraus com 3 e 9 mm de altura. A distribuição da razão de temperatura T/T_{∞} para o caso h = 6 mm é intermediária aos casos mostrados e não será apresentada.

A Figura 5.14 revela claramente que não-equilíbrio termodinâmico ocorre na camada de choque em função da falta de equilíbrio entre a temperatura de translação e as temperaturas associadas como os modos internos de energia, i.e., rotação e vibração. Não-equilíbrio térmico ocorre quando a temperatura dos modos internos difere da temperatura de translação. É importante ressaltar que a temperatura global T_G , obtida através da Equação (5.4), é equivalente a temperatura termodinâmica somente sob condições de equilíbrio térmico. Cabe ressaltar, também, que a equação de estado de gás perfeito não se aplica a esta temperatura em uma situação de não-equilíbrio.

De acordo com a Figura 5.14, tem-se que, no meio não-perturbado longe da superfície inferior, $Y \to \infty$, a temperatura de translação e as temperaturas de rotação e vibração possuem o mesmo valor e são iguais a temperatura termodinâmica. A medida que Y diminui, em direção a superfície inferior, a temperatura de translação atinge um valor máximo acima daquele atingido pela temperatura de rotação e pela temperatura de vibração. A temperatura de vibração aumenta bem menos do que a de rotação. Este comportamento se deve ao fato de que um grande número de colisões é necessário para excitar o modo de vibração das moléculas do mais baixo nível de energia para níveis mais energéticos. Diminuindo-se Y ainda mais, observa-



Figura 5.14 - Distribuição de temperaturas (T/T_{∞}) para duas seções ao longo da superfície inferior do degrau com face a montante como função da altura *h*.

se que, para a seção X = 10, a temperatura de translação diminui e tende a um determinado valor na superfície inferior que está acima da temperatura da parede $T_w (T_w/T_\infty \approx 4)$, resultando em uma diferença na temperatura em uma região muito próxima da superfície e definida no contínuo como "temperature jump". Deste modo, para $Y \approx 0$, $T_T \neq T_w$. Este comportamento é similar a aquele observado nos perfis de velocidade, ou seja, que $u/U_\infty \neq 0$ para $Y \approx 0$, uma característica de escoamento rarefeito. Em contrapartida, para a seção X = 48, nas vizinhanças da face do degrau, os perfis de temperatura indicam que o escoamento tende ao equilíbrio térmico muito próximo da parede, i.e., T_T , T_R , $T_V \in T_G$ tende ao valor de T_w .

Uma vez conhecido o comportamento das temperaturas T_T , T_R e T_V , e tendo-se definido uma temperatura global, é desejável ilustrar o comportamento da temperatura global ao longo das superfícies inferior e superior. Deste modo, as Figuras 5.15 e 5.16 apresentam a distribuição da temperatura global T_G/T_{∞} para seis seções ao longo das superfícies inferior e superior, respectivamente, como função da altura hdo degrau. Como base de comparação, o perfil de temperatura global para a placa plana é apresentado nos mesmos gráficos.



Figura 5.15 - Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície inferior do degrau com face a montante como função da altura *h*.



Figura 5.16 - Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície superior do degrau com face a montante como função da altura *h*.

Esta seção prossegue descrevendo o efeito da presença do degrau no perfil de temperatura. As Figuras 5.15 e 5.16, mostraram que a presença do degrau causou uma perturbação a montante no campo de temperatura. De modo similar a aquele utilizado para a massa específica e pressão, o efeito a montante, devido a presença do degrau, foi também estimado para a temperatura. Assim sendo, para a primeira fileira de células adjacentes a superfície inferior, calculou-se a diferença na temperatura de translação obtida para os dois casos, i.e., entre o caso com degrau e o caso da placa plana. Neste cenário, ΔT_{Tx} denota o aumento na temperatura de translação, devido a presença do degrau, em função da direção coordenada x. A Figura 5.17 apresenta a extensão deste efeito ao longo da superfície inferior. Neste grupo de gráficos, a diferença na temperatura de translação ΔT_{Tx} é normalizada pela temperatura do meio não-perturbado T_{∞} . Novamente, o gráfico da esquerda representa a extensão da perturbação a montante normalizada pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} e o da direita representa a mesma distância, em relação a posição do degrau, normalizada pela altura h do degrau.

O ponto de interação X_0 e a região de pré-separação X_{ps} relacionada com a temperatura de translação foram obtidos como função da altura h do degrau de modo similar a aqueles obtidos para a massa específica e pressão. A Tabela 5.4 resume os pontos de interação e as regiões de pré-separação relacionados com a temperatura de translação. Observa-se que na Tabela 5.4, X'_{0h} e X'_{ps} representam, respectivamente, o ponto de interação e a região de separação, normalizados por h, para o sistema de referência posicionado no degrau.

Tabela 5.4 - Ponto de interação e região de pré-separação relacionados com a temperatura de translação.

h	X_s	X_0	X_{ps}	X'_{sh}	X'_{0h}	X'_{ps}
3 mm	48,33	38,41	9,92	-0,52	- 3,59	3,07
6 mm	42,87	28,42	14,45	-1,10	- 3,34	2,24
9 mm	37,34	$27,\!59$	9,75	-1,31	- 2,31	1,00

Comparado com os dados mostrados nas Tabelas 5.2 e 5.3, conclui-se que o efeito a montante na temperatura de translação é basicamente da mesma ordem daquele para a massa específica e pressão. Este comportamento difere daquele observado no escoamento hipersônico ao redor de corpos rombudos, onde a perturbação a mon-



Figura 5.17 - Efeito a montante da influência do degrau na distribuição da temperatura de translação T_T adjacente a superfície inferior. (a) Direção coordenada x normalizada por λ_{∞} e (b) por *h*.

tante difere para cada propriedade primária. Nesse tipo de escoamento, o domínio da influência devido a presença do corpo rombudo no escoamento é maior para temperatura de translação, depois para a pressão e finalmente para massa específica.

Finalmente, de modo a concluir a discussão do campo de temperatura, a Figura 5.18 apresenta mapas de contorno da temperatura global nas vizinhanças dos degraus juntamente com linhas de corrente.

5.1.2 Degrau com face a Jusante

5.1.2.1 Campo de Velocidade

A distribuição da velocidade tangencial u/U_{∞} para seis seções ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante é apresentada na Figura 5.19 como função da altura h do degrau. De modo análogo ao degrau com face a montante, neste grupo de gráficos, X representa a distância x normalizada pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} , e Y a distância y acima da superfície superior (veja Figura 3.2) também normalizada por λ_{∞} . A título de comparação, o perfil de velocidade para a placa plana também foi apresentado nos mesmos gráficos.

De acordo com a Figura 5.19, observa-se que os perfis de velocidade não sofreram



Figura 5.18 - Distribuição da temperatura global (T_G/T_∞) nas vizinhanças do degrau com altura h de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

alteração com o aumento da altura h do degrau. Ademais, os perfis se mostram idênticos aqueles para a placa plana. Portanto, através de uma inspeção visual, o degrau com face a jusante demonstra não acarretar nenhum efeito a montante no perfil de velocidades, inclusive para seções muito próximas da quina do degrau, i.e., seção X = 49.5. Observa-se, também, que a intensidade da velocidade para $Y \approx 0$, ou seja, a velocidade ao longo da superfície superior do degrau bem como ao longo da superfície da placa plana para seções longe do degrau é diferente de zero, i.e, $u/U_{\infty} \neq 0$ para $Y \approx 0$. Como resultado, a condição de $u/U_{\infty} = 0$ na parede (no-slip velocity) não se aplica em escoamento rarefeito. Para um escoamento rarefeito com gradientes de velocidade e temperatura, a velocidade e temperatura do gás próximo a superfície serão diferentes daquelas da superfície. O gás adjacente a superfície, i.e., dentro de uma região de espessura de um livre caminho médio (camada de Knudsen), é constituído de moléculas refletidas da superfície e de moléculas vindo da borda externa dessa região. Deste modo, a velocidade e a temperatura do gás estarão entre estes dois limites. Se o livre caminho médio é muito pequeno, o gás atinge a velocidade e temperatura da superfície.

A distribuição da velocidade tangencial u/U_{∞} para seis seções ao longo da superfície inferior do degrau a jusante é mostrada na Figura 5.20 como função da altura hdo degrau. Neste grupo de gráficos, Y' é a distancia y+h acima da superfície inferior normalizada por λ_{∞} . Novamente, o perfil de velocidade para a placa plana, também mostrado, serve como referência. De acordo com o grupo de gráficos apresentados, vê-se que a presença dos degraus afeta o perfil de velocidades ao longo da superfície a frente dos degraus. Para seções próximas a face dos degraus, $X \leq 55$, os perfis de velocidade diferem daqueles da placa plana e apresentam velocidades negativas (backflow), indicando a presença de uma região de recirculação no escoamento. Análogo ao degrau com face a montante, a faixa de abrangência destas regiões de recirculação dependem da altura h dos degraus, i.e., aumentam com o aumento de h. Vê-se, também, que, para seções longe da face dos degraus, por exemplo, X =150, os perfis de velocidade são praticamente idênticos aqueles da placa plana sem degraus.

Com o propósito de enfatizar as características da região de recirculação, linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus são mostradas na Figura 5.21. Neste conjunto de gráficos, Y'_h representa a distância vertical y+h normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela



Figura 5.19 - Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.20 - Distribuição da velocidade tangencial (u/U_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.21 - Distribuição de linhas de corrente nas vizinhanças dos degraus com altura h de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo).

altura h do degrau. Baseado nesta figura, observa-se que, para as condições investigadas no presente trabalho, surge uma região de recirculação a frente dos degraus, conforme apontado anteriormente nos perfis de velocidade. Este comportamento é similar àquele normalmente encontrado em escoamentos sobre degraus no regime do contínuo, onde regiões de recirculação geralmente surgem a frente dos degraus (veja Figura 1.3). Observa-se, também, que o descolamento do escoamento ocorre na quina dos degraus, e o recolamento (ou aderência) do escoamento ocorre na superfície inferior imediatamente a face dos degraus. A partir desses pontos, o escoamento volta a se desenvolver e apresenta as características de um escoamento sobre uma placa plana, conforme confirmado pelos perfis das propriedades primárias. O ponto de recolamento x_r na superfície inferior foi obtido para a condição $\tau_w = 0$ (ou $C_f =$ 0). Para os degraus com altura de 3, 6, 9 mm, o ponto de recolamento X_r , i.e., x_r normalizado pelo livre caminho médio molecular λ_{∞} , corresponde, respectivamente a 50,51, 51,25 e 52,40. Em função da escala mostrada na Figura 5.21, os pontos de recolamento, X_{rh}^\prime correspondem a 0,16, 0,19 e 0,25 para altura h de 3, 6, e 9 mm, respectivamente. Cabe ressaltar que X'_{rh} representa $x_r - D$ normalizado pela altura h do degrau.

Finalmente, antes de se prosseguir com a análise do campo de massa específica, é desejável ilustrar a distribuição da intensidade do vetor velocidade $|\vec{V}|$, normalizado pela velocidade do meio não-perturbado U_{∞} , nas vizinhanças dos degraus. A Figura 5.22 apresenta esta grandeza juntamente com linhas de corrente. Esta figura mostra que, como esperado, a região de recirculação atrás dos degraus é uma região de baixa velocidade.

5.1.2.2 Campo de Massa Específica

O efeito da altura h de degraus com faces a jusante no campo de massa específica é mostrado na Figura 5.23 para seis seções ao longo da superfície superior. Neste grupo de diagramas, a massa específica ρ é normalizada pela massa específica do meio nãoperturbado ρ_{∞} . $X \in Y$ são as mesmas grandezas como definidas na Figura 5.19. Baseado no conjunto de diagramas mostrado, o comportamento da massa específica para a placa plana com degraus segue a mesma tendência daquele para o caso da placa plana sem degraus até próximo a seção X = 48. A partir de $X \ge 48$, a presença dos degraus afeta o campo de massa específica a montante dos degraus. Por outro lado, o efeito a montante está confinado em uma região acima da superfície com espessura da ordem de alguns λ_{∞} , mais especificamente, $y \le 4\lambda_{\infty}$. Como esperado,



Figura 5.22 - Distribuição da intensidade do vetor velocidade $(|\vec{V}|/U_{\infty})$ nas vizinhanças do degrau com altura *h* de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo).

a perturbação no escoamento, devido a presença dos degraus, é comunicada a montante via colisões das moléculas em uma região onde a velocidade é basicamente subsônica. Acima desta região, a velocidade do escoamento é muito próxima da velocidade do meio não-perturbado. Como base de comparação, para $y \leq 4\lambda_{\infty}$, tem-se que $u/U_{\infty} \approx 0.7$, conforme mostrado na Figura 5.19. No que se refere ao comportamento da massa específica na direção normal a superfície superior, vale as mesmas observações apontadas na discussão dos degraus com faces a montante.

Os perfis de massa específica ρ/ρ_{∞} para seis seções ao longo da superfície inferior do degrau são ilustrados na Figura 5.24 como função da altura *h* do degrau. Neste grupo de gráficos, *X* e *Y*' são distâncias normalizadas conforme apresentadas anteriormente por ocasião da distribuição de velocidade tangencial (Figura 5.20). Baseado neste grupo de gráficos, observa-se que os perfis de massa específica são afetados pela presença dos degraus. Como esperado, devido a expansão do escoamento ao redor da quina do degrau, a massa específica ρ diminui drasticamente quando comparada com a massa específica do meio não-perturbado ρ_{∞} nas vizinhanças da face do degrau. Esta diminuição na massa específica é mais acentuada a medida que a altura do degrau aumenta. Observa-se, também, que após o recolamento do escoamento na superfície inferior, a massa específica aumenta gradativamente ao longo da superfície e se aproxima dos valores obtidos para a placa plana.

Por último, torna-se desejável ilustrar mapas de contorno da massa específica nas vizinhanças dos degraus com faces a jusante. A Figura 5.25 apresenta mapas com a distribuição da massa específica juntamente com linhas de corrente. Nesta figura, Y'_h representa a distância vertical y+h normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau. Este conjunto de diagramas fornece uma idéia geral da extensão, em termos de h, da região de baixa massa específica devido a expansão do escoamento ao redor da quina dos degraus.



Figura 5.23 - Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.24 - Distribuição de massa específica (ρ/ρ_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a jusante como função da altura h.



Figura 5.25 - Distribuição da massa específica (ρ/ρ_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura h de 3 mm (acima) , 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo).

5.1.2.3 Campo de Pressão

O impacto da altura h dos degraus com faces a jusante no campo de pressão é ilustrado na Figura 5.26 para seis seções ao longo da superfície superior definidas por X = 10, 45, 48, 48, 5, 49 e 49, 5. Neste grupo de gráficos, a pressão p é normalizada pela pressão do meio não-perturbado p_{∞} . $X \in Y$ são as mesmas grandezas como definidas na Figura 5.19. De acordo com o grupo de gráficos mostrados, o comportamento da pressão é similar ao da massa específica, i.e., os perfis para a placa plana com degraus seguem a mesma tendência daqueles para o caso da placa plana sem degraus até próximo a seção X = 48. A partir de $X \ge 48$, o campo de pressão percebe a presença dos degraus.

A distribuição da razão de pressão p/p_{∞} ao longo da superfície inferior do degrau é apresentada na Figura 5.27 como função da altura h do degrau. Neste grupo de gráficos, $X \in Y'$ são distâncias normalizadas conforme apresentadas anteriormente (Figura 5.20). Baseado neste grupo de gráficos, nota-se que os perfis de pressão são afetados pela presença dos degraus com faces a jusante. Novamente, devido a expansão do escoamento ao redor da quina dos degraus, forma-se uma região de recirculação de baixa massa específica a frente dos degraus; como resultado, nesta região a razão de pressão p/p_{∞} diminui significativamente. Esta diminuição na pressão é mais acentuada a medida que a altura do degrau aumenta. Nota-se, também, que após o recolamento do escoamento na superfície inferior, o escoamento volta a se desenvolver ao longo da superfície e a pressão aumenta gradativamente e tende aos valores obtidos para a placa plana.

Finalmente, a Figura 5.28 apresenta mapas da razão de pressão p/p_{∞} nas vizinhanças das faces dos degraus juntamente com linhas de corrente. Nesta figura, Y'_h representa a distância vertical y+h normalizada pela altura h do degrau, e X'_h refere-se a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau. Similar aos mapas de massa específica, este conjunto de gráficos fornece uma visão da região afetada, em termos de h, devido a presença dos degraus.



Figura 5.26 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante como função da altura h.



Figura 5.27 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) ao longo da superfície inferior do degrau com face a jusante como função da altura h.



Figura 5.28 - Distribuição de pressão (p/p_{∞}) nas vizinhanças do degrau com altura *h* de 3 mm (acima) , 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo).

5.1.2.4 Campo de Temperatura

A distribuição de temperatura para duas seções ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante é mostrada na Figura 5.29 como função da altura h do degrau. Nesta figura, o gráfico (a) corresponde a uma seção longe do degrau, X = 10, e (b) a uma seção nas vizinhanças do degrau, X = 48. A razão de temperatura representa as temperaturas de translação T_T , de rotação T_R , de vibração T_V e a global T_G normalizadas pela temperatura T_{∞} do meio não-perturbado. Ademais, símbolos cheios e vazios correspondem, respectivamente, aos degraus com 3 e 9 mm de altura. A distribuição da razão de temperatura T/T_{∞} para o caso h = 6 mm é intermediária aos casos mostrados e não será apresentada.

A Figura 5.29 indica claramente que não-equilíbrio termodinâmico ocorre na camada de choque em função da falta de equilíbrio entre a temperatura de translação e as temperaturas associadas como os modos internos de energia, i.e., rotação e vibração. Conforme apontado na Subsubseção 5.1.1.4, não-equilíbrio térmico ocorre quando a temperatura referente aos modos internos difere da temperatura de translação. Neste sentido, o comportamento da temperatura para os degraus com faces a jusante é similar aquele para os degraus com faces a montante no que diz respeito ao não-equilíbrio térmico. Todavia, difere na magnitude da razão de temperaturas nas vizinhanças dos degraus, uma vez que, o escoamento ao redor do degrau com face a montante está relacionado com uma compressão e o escoamento ao redor do degrau com face a jusante a uma expansão.

Ainda como resultado do processo de compressão e expansão, diferenças marcantes podem ser observadas na razão de temperatura na seção X = 48. Para o caso do degrau com face a jusante, as temperaturas T_T , T_R , $T_V \in T_G$ diferem da temperatura da parede, T_w , para $Y \approx 0$, resultando em uma diferença na temperatura definida como "temperature jump". Em contraste, para o caso do degrau com face a montante (Figura 5.14), os perfis de temperatura indicam que o escoamento tende ao equilíbrio térmico muito próximo da parede, i.e., T_T , T_R , $T_V \in T_G$ tendem ao valor de T_w .

Na mesma esteira seguem as distribuições de temperatura de translação, rotação, vibração e global na superfície inferior do degrau de face a jusante. O comportamento destas temperaturas é ilustrado na Figura 5.30 para seções as seções X = 51 e 150, i.e., uma seção nas vizinhanças da face do degrau e outra bem afastada da face.



Figura 5.29 - Distribuição de temperaturas (T/T_{∞}) para duas seções ao longo da superfície superior do degrau com face a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.30 - Distribuição de temperaturas (T/T_{∞}) para duas seções ao longo da superfície inferior do degrau a jusante como função da altura *h*.

Após conhecer o comportamento das temperaturas T_T , T_R , $T_V \in T_G$, torna-se importante ilustrar o comportamento da temperatura global T_G para os degraus de faces a jusante e compará-lo com aquele da placa plana. Deste modo, as Figura 5.31 e 5.32 apresentam a distribuição da temperatura global T_G/T_{∞} para seis seções ao longo das superfícies superior e inferior, respectivamente, como função da altura h.



Figura 5.31 - Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície superior do degrau a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.32 - Distribuição de temperatura global (T_G/T_∞) ao longo da superfície inferior do degrau a jusante como função da altura *h*.



Figura 5.33 - Distribuição da temperatura global (T_G/T_∞) nas vizinhanças do degrau com altura h de 3 mm (acima), 6 mm (meio) e 9 mm (abaixo).

De acordo com este grupo de gráficos, significantes diferenças na temperatura global são observadas nos perfis ao longo da superfície inferior dos degraus.

Finalmente, de modo a concluir a discussão do campo de temperatura dos degraus com faces a jusante, a Figura 5.33 apresenta mapas de contorno da temperatura global nas vizinhanças dos degraus juntamente com linhas de corrente.

5.2 Propriedades Aerodinâmicas na Superfície

As propriedades aerodinâmicas de particular interesse neste trabalho são o fluxo de partículas, o fluxo de calor, a pressão e a tensão cisalhante agindo na superfície. Nesta seção, estas propriedades, expressas em forma de coeficientes, serão apresentadas e discutidas separadamente para os degraus com face a montante e a jusante.

5.2.1 Degrau com face a montante

5.2.1.1 Fluxo de Moléculas

O fluxo de moléculas, N_f , é calculado a partir de uma média das amostras das moléculas colidindo com a superfície por unidade de tempo e de área. A distribuição do fluxo de moléculas ao longo das superfícies – inferior, superior e face – do degrau é ilustrada na Figura 5.34 como função da altura h do degrau. Nesta figura, N_f representa o fluxo de moléculas N normalizado por $n_{\infty}U_{\infty}$, onde $n_{\infty} \in U_{\infty}$ representam, respectivamente, a concentração de moléculas e a velocidade no meio não-perturbado. Como base de comparação, o fluxo de moléculas adimensional N_f para a placa plana também está ilustrado na Figura 5.34.

De acordo com a Figura 5.34(a) observa-se que o fluxo de moléculas para a superfície depende da altura h do degrau. Próximo do bordo de ataque, o comportamento do fluxo de moléculas para a placa plana com degrau é similar aquele para a placa plana sem degrau. Comportamento esperado considerando-se que nesta região o escoamento não tem conhecimento da presença do degrau. A medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície inferior, a presença do degrau é percebida no fluxo de moléculas a partir da seção X correspondente aproximadamente a 32,6, 38,1 e 43,4, para degraus com altura h de 9, 6 e 3 mm, respectivamente. Nas regiões compreendidas entre estas seções e a seção onde os degraus estão localizados, X = 50, o fluxo de moléculas para a superfície aumenta dramaticamente quando comparado com o fluxo de moléculas observado no caso da placa plana sem degrau.



Figura 5.34 - Distribuição do fluxo de moléculas (N_f) para as superfícies (a) inferior e superior e para a (b) face do degrau a montante como função da altura h.

Esta região, onde ocorre o aumento no fluxo de moléculas, está diretamente relacionada com a região de recirculação que se forma a montante do degrau. A região de recirculação concentra um grande número de moléculas. Essas moléculas, concentradas na região de recirculação, ao colidirem com a superfície inferior e a face do degrau, aumentam não somente o fluxo de moléculas para a superfície inferior e para a face do degrau como também aumentam a troca de energia e momento linear.

Baseado na Figura 5.34(b), vê-se que o fluxo de moléculas para a face do degrau é mais intenso do que aquele observado para a superfície inferior. De modo similar a aquele mostrado para a superfície inferior, o fluxo de moléculas para a face do degrau é função da altura h do degrau, i.e., aumenta a medida que a altura h aumenta. Dois picos no fluxo podem ser observados, um muito próximo da base e o outro nas vizinhanças da quina do degrau. O segundo pico no fluxo de moléculas ocorre para a posição Y igual a 2,7, 5,9 e 9,2 correspondente a h de 3, 6 e 9 mm, respectivamente. A título de ilustração, o ponto de recolamento Y_r do escoamento na face do degrau foi estimado em 2,6, 5,6 e 8,7 para h de 3, 6, e 9 mm, respectivamente.

5.2.1.2 Coeficiente de Transferência de Calor

O coeficiente de transferência de calor C_h é definido pela seguinte expressão,

$$C_h = \frac{q_w}{1/2\rho_\infty U_\infty{}^3} \tag{5.8}$$

onde q_w é o fluxo de calor liquido para a superfície do degrau.

O fluxo de calor q_w é calculado a partir do fluxo de energia liquido das moléculas colidindo com a superfície. Um fluxo positivo é definido quando direcionado para a superfície. O fluxo liquido q_w está relacionado com a soma das energias de translação, rotação e vibração das moléculas incidindo e refletindo da superfície, sendo calculado pela seguinte equação,

$$q_w = q_i + q_r = \frac{1}{A\Delta t} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{1}{2}m_j c_j^2 + e_{Rj} + e_{Vj}\right]_i + \left[\frac{1}{2}m_j c_j^2 + e_{Rj} + e_{Vj}\right]_r$$
(5.9)

onde N é o número de moléculas colidindo na superfície de área A no intervalo de tempo Δt , $e_R \in e_V$ representam, respectivamente, as energias de rotação e vibração das moléculas, e os sub-índices $i \in r$ referem-se as moléculas incidentes e refletidas.

A distribuição do coeficiente de transferência de calor C_h ao longo das superfícies – inferior, superior e face – do degrau é apresentada na Figura 5.35 como função da altura h do degrau. Baseado na Figura 5.35, importantes características no comportamento do coeficiente de calor podem ser observadas: (1) similar ao fluxo de moléculas, o coeficiente de transferência de calor para o degrau apresenta o mesmo comportamento que aquele da placa plana na região próxima do bordo de ataque; região não afetada pela presença do degrau, (2) ao longo da superfície inferior, o coeficiente de transferência de calor apresenta pontos de máximo próximos a face do degrau, em seguida diminui praticamente a zero no ponto de estagnação, (3) na superfície superior, o coeficiente de transferência de calor apresenta um valor máximo na quina do degrau e diminui a jusante ao longo da superfície, praticamente alcançando os valores observados para a placa plana sem degrau, (4) o coeficiente de transferência de calor apresenta um aumento contínuo na face do degrau, aumentando de zero, no ponto de estagnação, para um valor máximo próximo do bordo do degrau que é função da altura h do degrau, (5) a taxa de crescimento do coeficiente



Figura 5.35 - Distribuição do coeficiente de transferência de calor (C_h) para as superfícies (a) inferior e superior e para a (b) face do degrau a montante como função da altura h.

de transferência de calor na face do degrau aumenta dramaticamente na região onde o escoamento volta a aderir a superfície e, finalmente, (6) os valores de pico observados para o coeficiente de transferência de calor na face do degrau são uma ordem de grandeza maior do que aqueles observados na superfície inferior.

Uma característica de interesse particular na investigação do comportamento do coeficiente de transferência de calor diz respeito ao aparecimento de picos na superfície inferior devido a presença do degrau no escoamento. Como mostrados na Figura 5.35, os valores máximos observados para o coeficiente de transferência de calor e a localização em que eles ocorrem dependem da altura h do degrau. Para os degraus de 3, 6 e 9 mm, os valores máximos correspondem a X de aproximadamente 47,4, 42,5 e 37,4, respectivamente. Em contrapartida, o ponto de separação X_s corresponde a 48,3, 42,8 e 37,3 para os degraus de 3, 6 e 9 mm, respectivamente. Portanto, o ponto de máximo no fluxo de calor para a superfície inferior basicamente coincide com o ponto de separação. Após o ponto de máximo, o fluxo de calor para superfície diminui até atingir o valor mínimo, em torno de zero, no ponto de estagnação. Todavia, este comportamento difere para o degrau de 9 mm, onde um segundo ponto de máximo surge muito próximo a face do degrau, mais precisamente para X = 49,2.

Um exame mais cuidadoso foi realizado com o propósito de se identificar o processo

físico responsável pelo aparecimento deste segundo pico no coeficiente de transferência de calor. De acordo com as Equações 5.8 e 5.9, o coeficiente de transferência de calor pode ser separado em duas parcelas: uma parcela referente a contribuição da energia incidente e uma outra correspondente a contribuição da energia refletida da superfície do degrau. Neste contexto, a Figura 5.36 ilustra a distribuição destas duas contribuições ao longo da superfície inferior para os degraus de 3, 6 e 9 mm de altura. Neste grupo de gráficos, $(C_h)_i$, $(C_h)_r$ e C_h correspondem, respectivamente, ao coeficiente de transferência de calor incidente, refletido e total.

De acordo com a Figura 5.36, nota-se que o ponto de máximo no coeficiente de transferência de calor está diretamente relacionado com o fluxo de calor incidente na superfície do degrau. Nota-se, também, que um ponto de máximo surge na distribuição de $(C_h)_i$ para o degrau com h = 3 mm e dois pontos de máximo para o degrau com h = 9 mm. O caso intermediário, h = 6 mm, embora apresente um único ponto de máximo, dá sinais da formação de um segundo ponto de máximo na distribuição de $(C_h)_i$. A parcela do fluxo de calor incidente $(C_h)_i$ para a superfície é composta pelas contribuições das energias de translação, rotação, e vibração das moléculas, conforme a Equação 5.9. Neste sentido, a Figura 5.37 ilustra as contribuições de cada modo de energia ao longo da superfície inferior para os degraus de 3, 6 e 9 mm de altura. Neste grupo de diagramas, os sub-índices $T, R \in V$ correspondem, respectivamente, aos modos de energia referente a translação, rotação e vibração das moléculas.

Analisando-se cuidadosamente a Figura 5.37, verifica-se que os três modos de energia contribuem para a formação dos picos no fluxo de calor para a superfície inferior. Verifica-se, também, que a energia de translação contribui com a maior parcela, seguida pela energia de rotação e, finalmente, pela energia de vibração. O processo físico que possivelmente resulta na presença dos picos no coeficiente de transferência de calor, localizados em X = 47,4, 42,5 e 37,4, pode ser explicado como segue. Conforme mostrado anteriormente, a localização dos picos corresponde a região de recirculação. Parte das moléculas confinadas na região de recirculação colidem com a face do degrau. Essas moléculas trocam energia com a face frontal do degrau (veja Figura 5.35) e são refletidas com energia referente a temperatura T_w da superfície. De volta a região de recirculação, que segue em sentido horário, parte dessas moléculas colidem com a superfície inferior e trocam energia com a superfície. É importante ressaltar que, embora sejam moléculas com baixa energia, quando comparadas com



Figura 5.36 - Distribuição do coeficiente de transferência de calor incidente, refletido e total ao longo da superfície inferior do degrau com altura h de (a) 3 mm, (b) 6 mm e (c) 9 mm.



Figura 5.37 - Contribuição das energias de translação, rotação e vibração para o coeficiente de transferência de calor incidente ao longo da superfície inferior do degrau com altura *h* de (a) 3 mm, (b) 6 mm e (c) 9 mm.
aquelas do meio não-perturbado, essas moléculas contribuem significativamente para o aumento do fluxo de calor para a superfície em função do grande número de moléculas nesta região, colidindo não somente com a superfície inferior bem como com a face do degrau, conforme mostrado na Figura 5.34. Entretanto, uma questão ainda permanece em aberto, ou seja, que processo físico seria responsável pelo segundo pico no fluxo de calor para a superfície do degrau com h = 9 mm, localizado em X = 49,2. Uma explicação para o aparecimento desse segundo pico será dada subseqüentemente.

5.2.1.3 Coeficiente de Pressão

O coeficiente de pressão C_p é definido pela seguinte expressão,

$$C_{p} = \frac{p_{w} - p_{\infty}}{1/2\rho_{\infty}U_{\infty}^{2}}$$
(5.10)

onde p_w é a pressão agindo na superfície do degrau.

A pressão p_w sobre a superfície de um corpo é calculada através do fluxo de momento normal das moléculas incidindo e refletindo da superfície como segue,

$$p_w = p_i + p_r = \frac{1}{A\Delta t} \sum_{j=1}^{N} [m_j v_j]_i + [m_j v_j]_r$$
(5.11)

onde v_j é a componente da velocidade da molécula j na direção normal a superfície.

A distribuição do coeficiente de pressão C_p ao longo das superfícies – inferior, superior e face – do degrau é mostrada na Figura 5.38 como função da altura h do degrau. Baseado na Figura 5.38, observa-se que o comportamento do coeficiente de pressão segue a mesma tendência daquele mostrado para o fluxo de moléculas para a superfície do degrau no sentido de que: (1) próximo do bordo de ataque, o comportamento do coeficiente de pressão para a placa plana com degrau é similar aquele para a placa plana sem degrau, (2) a presença do degrau é percebida no coeficiente de pressão a partir da seção X correspondente aproximadamente a 32,6, 38,1 e 43,4,



Figura 5.38 - Distribuição do coeficiente de pressão (C_p) para as superfícies (a) inferior e superior e para a (b) face do degrau a montante como função da altura h.

para degraus com altura h de 9, 6 e 3 mm, respectivamente, (3) entre estas seções e a seção onde os degraus estão localizados, X = 50, o coeficiente de pressão aumenta dramaticamente quando comparado com o coeficiente de pressão observado no caso da placa plana sem degrau, (4) os máximos valores para o coeficiente de pressão ocorrem no ponto de estagnação, na junção entre a superfície inferior e a face do degrau. De modo similar ao fluxo de moléculas, esta região, onde ocorre o aumento no coeficiente de pressão, está diretamente relacionada com a região de recirculação que se forma a montante do degrau. Essas moléculas, confinadas na região de recirculação, ao colidirem com a superfície inferior e a face do degrau, aumentam o fluxo de momento normal para a superfície inferior e para a face do degrau.

O comportamento da distribuição de pressão agindo na superfície inferior do degrau com h = 3 mm pode ser comparada qualitativamente com os dados apresentados por Pullin e Harvey (1977). Pullin e Harvey (D.I.PULLIN; J.K.HARVEY, 1977) investigaram numericamente o escoamento rarefeito hipersônico sobre um degrau a montante utilizando-se o método DSMC. As principais condições do meio não-perturbado, gás N_2 , foram definidas como M_{∞} de 22,9 e T_{∞} de 20 K. O degrau, posicionado a 48 λ_{∞} do bordo de ataque de uma placa plana, foi mantido a uma temperatura T_w de 288 K, o que corresponde a $T_w/T_{\infty} = 14,4$. Embora não tenha sido definida diretamente na nota técnica, a altura do degrau foi estimada, baseada nos gráficos, como estando



Figura 5.39 - Distribuição da razão de pressão (p_w/p_{∞}) agindo na superfícies (a) inferior e superior e na (b) face do degrau com face a montante com h = 3 mm.

na faixa de $3\lambda_{\infty} < h < 5\lambda_{\infty}$. Ainda de acordo com a nota técnica, as condições do escoamento bem como as características do degrau foram escolhidas de modo a reproduzir a investigação experimental realizada por Jeffrey (1973, citado por Pullin e Harvey, 1977), uma comunicação particular não disponível para a comunidade científica.

Neste contexto, a Figura 5.39 apresenta uma comparação qualitativa para a razão de pressão p_w/p_{∞} ao longo da superfície do degrau com h = 3 mm investigado no presente trabalho com aqueles investigados numericamente por Pullin e Harvey (D.I.PULLIN; J.K.HARVEY, 1977) e experimentalmente por Jeffrey (1973, citado por Pullin e Harvey, 1977). Neste conjunto de gráficos, X' e Y representam, respectivamente, a distância x-D e a coordenada y normalizados pelo livre caminho médio λ_{∞} . De acordo com a Figura 5.39, os resultados apresentam uma boa concordância na distribuição da razão de pressão ao longo das superfícies inferior e superior do degrau. Todavia, difere razoavelmente na face do degrau. Apesar de diferenças marcantes nas condições do escoamento, a comparação é vista como relevante no sentido de que a razão p_w/p_{∞} apresenta uma mesma tendência entre os três casos investigados.

5.2.1.4 Coeficiente de Atrito

O coeficiente de atrito C_f é definido pela seguinte expressão,

$$C_f = \frac{\tau_w}{1/2\rho_\infty U_\infty^2} \tag{5.12}$$

onde τ_w é a tensão cisalhante agindo na superfície do degrau.

A tensão τ_w sobre a superfície de um corpo é calculada através do fluxo de momento tangencial das moléculas incidindo e refletindo da superfície como segue,

$$\tau_w = \tau_i + \tau_r = \frac{1}{A\Delta t} \sum_{j=1}^{N} [m_j u_j]_i + [m_j u_j]_r$$
(5.13)

onde u_j é a componente de velocidade da molécula j na direção tangencial a superfície.

No presente trabalho, adotou-se a reflexão difusa como o modelo de interação gássuperfície. Na reflexão difusa, as moléculas refletidas da superfície possuem momentum tangencial igual a zero, uma vez que, as moléculas perdem, na média, a componente tangencial da velocidade. Neste contexto, o fluxo liquido de momentum tangencial das moléculas, Equação 5.13, se reduz a seguinte expressão,

$$\tau_w = \tau_i = \frac{1}{A\Delta t} \sum_{j=1}^{N} [m_j u_j]_i$$
(5.14)

A distribuição do coeficiente de atrito C_f ao longo das superfícies – inferior, superior e face – do degrau é ilustrada na Figura 5.40 como função da altura h do degrau. A Figura 5.40 indica que o efeito do degrau no coeficiente de atrito é sentido a montante do degrau aproximadamente para uma distância X de 32,6, 38,1 e 43,4, correspondente aos degraus com altura h de 9, 6 e 3 mm, respectivamente. A partir destas seções, o coeficiente de atrito diminui, quando comparado com aquele da placa



Figura 5.40 - Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) para as superfícies (a) inferior e superior e para a (b) face do degrau com face a montante como função da altura h.

plana, e atinge valor zero para X definido por 37,3, 42,8 e 48,3 para os degraus de 9, 6 e 3 mm, respectivamente. Cabe observar que, as seções correspondentes a condição $C_f = 0$ ou $\tau_w = 0$ foi utilizada para definir o ponto de separação do escoamento. Em seguida, como resultado da região de recirculação, o coeficiente de atrito continua diminuindo até atingir um ponto de mínimo. Após o ponto de mínimo, volta a aumentar e, novamente, atinge valores próximos a zero no ponto de estagnação, na base do degrau. Na face frontal do degrau, o coeficiente de atrito é negativo até o ponto em que o escoamento volta a aderir a superfície, ponto de recolamento. Deste ponto até a quina do degrau, a região é basicamente exposta a um escoamento de alta velocidade, o coeficiente de atrito aumenta drasticamente. Logo depois, devido a expansão do escoamento ao redor da quina do degrau, o coeficiente de atrito diminui pela metade no inicio da superfície superior. Ao longo da superfície superior, o coeficiente de atrito continua diminuindo e atinge o valor observado para a placa plana sem degrau.

Uma análise mais cuidadosa na distribuição do coeficiente de atrito C_f revela importantes peculiaridades do escoamento nas imediações da base dos degraus. Conforme mostrado na Figura 5.40, o coeficiente de atrito, após atingir um valor mínimo negativo, volta a aumentar, atingindo valores próximos de zero no ponto de estagnação na base do degrau. Uma ampliação da Figura 5.40, nas imediações da base do degrau,



Figura 5.41 - Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) nas vizinhanças da face do degrau em função da altura h.

indica que o coeficiente de atrito se torna positivo nesta região, mais precisamente na seções X = 49,38, 49,43 e 49,23 correspondentes aos degraus com h de 3, 6 e 9 mm, respectivamente, conforme revela a Figura 5.41. Portanto, tem-se que o coeficiente de atrito começa positivo no bordo de ataque, se torna negativo ao longo da superfície inferior e, já muito próximo da base do degrau, volta a ficar positivo. Cabe ressaltar que a mudança de sinal positivo para negativo no coeficiente de atrito C_f indicou uma mudança no sentido do escoamento, por conseguinte uma região de recirculação, conforme mostrado na Figura 5.4. Logo, uma nova mudança de sinal, de negativo para positivo, acena com a possibilidade de uma segunda região de recirculação muito próxima da base do degrau. Após uma ampliação da Figura 5.4, nas imediações da base do degrau, revela-se a formação de uma segunda região de recirculação em um escala muito menor do que a mostrada anteriormente.

A Figura 5.42 ilustra a formação da segunda região de recirculação. Nesta figura, Y_h representa a distância vertical y normalizada pela altura h do degrau, e X'_h referese a distância horizontal x-D também normalizada pela altura h do degrau. Desta figura, nota-se claramente que, para as condições investigadas no presente trabalho, surge uma segunda região de recirculação a frente do degrau. Esta segunda região, em sentido anti-horário, portanto contrária a mostrada anteriormente, começa a se formar para o caso h = 3 mm, aumenta a região de atuação no caso h = 6 mm e, se mostra como uma região bem definida, completa, para o caso h = 9 mm.



Figura 5.42 - Distribuição das linhas de corrente nas vizinhanças da base dos degraus com altura *h* de 3 mm (superior), 6 mm (meio) e 9 mm (inferior).

Cabe enfatizar que, embora seja uma região formada por moléculas com baixa velocidade, trata-se de uma região com as maiores concentrações de moléculas, i.e., com a massa específica na faixa de 30 (para h = 3 mm) a 70 vezes (para h = 9 mm) a massa específica ρ_{∞} do meio não-perturbado. Confinadas nesta região, provavelmente parte dessas moléculas colide com a superfície inferior trocando energia e momento. De volta a região de recirculação, essas moléculas colidem com a superfície frontal do degrau, trocando novamente momento e energia. Como resultado, um grande fluxo de moléculas para as paredes próximas a base dos degraus é observado, como mostrado na Figura 5.34. Cabe enfatizar que, a presença do segundo pico no coeficiente de transferência de calor C_h , para o caso h = 9 mm, surge como resultado desta segunda região de recirculação muito próxima a base do degrau, i.e., do comportamento da moléculas confinadas nesta região.

5.2.2 Para os casos com face a jusante

5.2.2.1 Fluxo de Moléculas

O efeito da altura h do degrau no fluxo de moléculas ao longo das superfícies – superior, inferior e face – do degrau é ilustrado na Figura 5.43. Neste grupo de gráficos, N_f representa o fluxo de moléculas N normalizado por $n_{\infty}U_{\infty}$, onde n_{∞} e U_{∞} representam, respectivamente, a concentração de moléculas e a velocidade no meio não-perturbado, $X \in Y$ correspondem as distâncias $x \in y$ normalizadas pelo livre caminho médio λ_{∞} do meio não-perturbado. Como base de comparação, o fluxo de moléculas N_f para a placa plana também está ilustrado na Figura 5.43.

De acordo com a Figura 5.43 (a), observa-se que, do bordo de ataque até bem próximo da localização do degrau, o comportamento do fluxo de moléculas para a placa plana com degrau é similar aquele para a placa plana sem degrau. Comportamento esperado considerando-se que nesta região o escoamento não tem conhecimento da presença do degrau. Entretanto, muito próximo a quina do degrau, observa-se um queda no fluxo de moléculas em função da expansão do escoamento ao redor da quina. Em seguida, ao longo da superfície inferior, o fluxo de moléculas é praticamente nulo muito próximo da face do degrau e aumenta significativamente a medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície. Para o escoamento, o degrau com face a jusante representa uma "descontinuidade" na superfície. Neste contexto, quanto menor esta "descontinuidade", i.e., menor a altura h do degrau, mais rapidamente o escoamento tende a recuperar o comportamento do fluxo de moléculas



Figura 5.43 - Distribuição do fluxo de moléculas (N_f) para as superfícies (a) superior e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da altura h.

observado na placa plana sem degraus.

Baseado na Figura 5.43 (b), vê-se que o fluxo de moléculas para a face do degrau é uma ordem de grandeza menor do que aquele observado para as superfícies superior e inferior. Este comportamento está diretamente relacionado com a região de recirculação. A região de recirculação a jusante do degrau é uma região de baixa massa específica, conforme mostrado na Figura 5.24. De modo similar a aquele mostrado para a superfície inferior, o fluxo de moléculas para a face do degrau é função da altura do h do degrau, i.e., diminui a medida que a altura h aumenta.

5.2.2.2 Coeficiente de Transferência de Calor

A distribuição do coeficiente de transferência de calor C_h ao longo das superfícies – superior, inferior e face – do degrau é apresentada na Figura 5.44 como função da altura h do degrau. Baseado na Figura 5.44 (a), nota-se que, similar ao fluxo de moléculas, o coeficiente de transferência de calor para a superfície superior do degrau apresenta o mesmo comportamento que aquele da placa plana, desde o bordo de ataque até próximo da quina do degrau. Ao longo da superfície inferior, o coeficiente de transferência de calor também apresenta um comportamento análogo ao comportamento observado para fluxo de moléculas, i.e., o fluxo de moléculas é praticamente nulo muito próximo da face do degrau e aumenta significativamente a



Figura 5.44 - Distribuição do coeficiente de transferência de calor (C_h) para as superfícies (a) superior e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da altura h.

medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície. Na face do degrau, Figura 5.44 (b), os valores observados para o coeficiente de transferência de calor são duas ordens de grandeza menor do que aqueles observados na superfície inferior. Este comportamento se deve ao fato da região de recirculação ser uma região de baixa massa específica (Figura 5.24), com moléculas com baixas velocidades (Figura 5.20) e temperatura da ordem da temperatura T_w da superfície (Figura 5.32). Como resultado, existe praticamente um equilíbrio entre a contribuição do fluxo de calor incidente e refletido, Equação (5.9), uma vez que, estão envolvidas moléculas com baixa energia.

5.2.2.3 Coeficiente de Pressão

O impacto da altura do degrau na distribuição do coeficiente de pressão C_p ao longo das superfícies – superior, inferior e face – do degrau é mostrado na Figura 5.45. De acordo com a Figura 5.45, nota-se claramente que o comportamento do coeficiente de pressão segue a mesma tendência daquele mostrado para o fluxo de moléculas para a superfície do degrau no sentido de que: (1) do bordo de ataque até bem próximo da quina do degrau, o comportamento do coeficiente de pressão para a placa plana com degrau é similar aquele para a placa plana sem degrau, (2) a presença do degrau na superfície superior é percebida no coeficiente de pressão em uma região muito próxima da localização da face, (3) nesta região, o coeficiente de pressão apresenta



Figura 5.45 - Distribuição do coeficiente de pressão (C_p) para as superfícies (a) superior e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da altura h.

uma queda acentuada quando comparado com o coeficiente de pressão observado no caso da placa plana sem degrau, (4) os menores valores para o coeficiente de pressão ocorrem na face do degrau. De modo similar ao fluxo de moléculas e ao fluxo de transferência de calor, os menores valores no coeficiente de pressão estão diretamente relacionados com a região de recirculação, conforme apontado anteriormente.

5.2.2.4 Coeficiente de Atrito

A influência da altura h do degrau na distribuição do coeficiente de atrito C_f ao longo das superfícies – superior, inferior e face – do degrau é ilustrada na Figura 5.46. A Figura 5.46 indica que, de modo geral, o coeficiente de atrito segue um comportamento similar àquele apresentado pelo fluxo de moléculas, coeficiente de transferência de calor bem como o coeficiente de pressão. Na superfície superior, o coeficiente de atrito para a placa plana com degrau segue o coeficiente de atrito para a placa plana sem degrau até bem próximo a localização da quina do degrau. Na superfície inferior, o coeficiente de atrito é negativo próximo da face do degrau, torna-se positivo por ocasião do recolamento do escoamento e aumenta próximo dos valores observados para a placa plana sem degraus a medida que o escoamento se desenvolve ao longo da superfície. A condição $C_f = 0$ ou $\tau_w = 0$, utilizada para definir o ponto de recolamento do escoamento, ocorre para as seções X = 50,51, 51,25 e 52,40 para



Figura 5.46 - Distribuição do coeficiente de atrito (C_f) para as superfícies (a) superior e inferior e para a (b) face do degrau com face a jusante como função da altura h.

h de 3, 6, e 9 mm, respectivamente. Novamente, em função da região de recirculação, o coeficiente de atrito ao longo da face do degrau é, pelo menos, uma ordem de grandeza menor do que aquele observado ao longo da superfície superior.

6 CONCLUSÕES

Por intermédio do método DSMC, a estrutura do escoamento e as propriedades aerodinâmicas na superfície de degraus com faces a montante e a jusante foram investigadas. As simulações forneceram informações referentes a natureza do campo de escoamento ao redor de degraus com faces de diferentes tamanhos considerandose um escoamento hipersônico rarefeito bidimensional. O comportamento do escoamento foi investigado para degraus com faces de 3, 6, e 9 mm de altura, e comparado com aquele de uma placa plana sem degraus. Uma descrição detalhada do comportamento das propriedades primárias, tais como, velocidade, massa específica, pressão e temperatura, foi apresentada separadamente para as superfícies inferior, superior e face dos degraus.

Com relação ao degrau com face a montante, a análise mostrou que mudanças na altura do degrau afetaram o campo de escoamento a frente do degrau. A extensão deste efeito aumentou com o aumento da altura da face do degrau. A análise mostrou, também, que a localização do ponto de interação e o tamanho da região de separação a frente dos degraus foram basicamente iguais para as propriedades primárias quando comparados com o livre caminho médio molecular ou com a altura dos degraus. As propriedades aerodinâmicas na superfície do degrau foram influenciadas pela região de recirculação a frente do degrau. Picos de pressão e picos no fluxo de calor foram observados próximos a face dos degraus decorrentes da região de circulação que se formou a frente dos degraus.

No que concerne ao degrau com face a jusante, o estudo mostrou que a estrutura do escoamento após o degrau é afetada pela altura da face. Uma região de recirculação surgiu imediatamente após a face do degrau com a separação do escoamento localizada na quina do degrau. O estudo mostrou, também, que após a região de recirculação, ocorre o recolamento do escoamento e o mesmo se desenvolve ao longo da superfície inferior de modo similar ao escoamento ao longo de uma placa plana. As propriedades aerodinâmicas na superfície inferior do degrau foram influenciadas pela altura da face. Entretanto, nenhum pico de máximo foi observado.

TRABALHO FUTURO

A presente dissertação descreveu uma investigação inicial sobre degraus com faces a montante e a jusante visando simular imperfeições ou defeitos presentes na superfície de veículos hipersônicos. Embora esta investigação tenha levado em conta o efeito da altura da face para uma faixa representativa de valores, melhoramentos nas condições investigadas, de modo a tornar o estudo mais significativo, se tornam imperativos.

O primeiro melhoramento diz respeito a incorporação de reações químicas, levandose em conta a dissociação e até mesmo possível recombinação. A camada de choque ao redor de veículos hipersônicos na reentrada é caracterizada por um alto grau de não-equilíbrio térmico e químico. Em tais condições, o campo de escoamento pode resultar em um significante aumento do fluxo de calor para a superfície como resultado do não-equilíbrio térmico e/ou químico. Portanto, prever tais efeitos será útil no cálculo das cargas térmicas bem como necessário para adequar o sistema de proteção térmica.

Reflexão difusa com acomodação térmica completa foi o modelo de interação gássuperfície utilizado neste estudo. Todavia, quando um veículo espacial é exposto a um meio rarefeito, por um período de tempo considerável, a interação gás-superfície se afasta do modelo de reflexão difusa, uma vez que, as moléculas colidindo com a superfície tendem a "limpar" a superfície do veículo. Moléculas refletidas de uma superfície limpa apresentam uma distribuição de forma lobular, que é centrada sobre um determinado ângulo que tende a se aproximar do ângulo de uma reflexão especular, para escoamento com alta energia. Neste cenário, simulações com acomodação incompleta, considerando-se coeficientes de acomodação variando independentemente podem fornecer o impacto do modelo de interação gás-superfície nas quantidades aerotermodinâmicas.

A temperatura da superfície do degrau pode ter um efeito importante na estrutura do escoamento bem como nas propriedades aerodinâmicas na superfície do degrau. A medida que a temperatura da superfície aumenta, as moléculas são refletidas com mais energia. Neste sentido, o efeito devido a presença do degrau pode ser sentido mais a montante. Ademais, os picos nas cargas de pressão e no fluxo de calor podem ser significantemente alterados.

Finalmente, podem ser acrescidos a esta lista, os efeitos do número de Mach, o impacto do ângulo de ataque, bem como a influência de parâmetros geométricos, por exemplo, a distância D a frente dos degraus.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABE, T. Rarefied gas flow analysis by direct simulation monte carlo method in body-fitted coordinate system. Journal of Computational Physics, v.83, p. 424–432, 1989. 63

_____. Generalized scheme of the no-time-counter scheme for the dsmc in rarefied gas flow analysis. **Computers Fluids**, v.22, n. 2-3, p. 253–257, 1993. 42, 47

ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Studies in molecular dynamics. Journal of Chem. Phys., v.27, p. 1208–1209, 1957. 37

_____. Molecular dynamics by electronic computers. **Transport Processes in Statistical Mechanics**, Ed. I. Prigogine, New York, Interscience, p. 97–131, 1958. 37

BAGANOFF, D.; MCDONALD, J. D. A collision-selection rule for a particle simulation method suited to vector computers. **Physics of Fluids**, v. A2, n.7, p. 1248–1259, 1990. 48

BECKER, M.; ROBBEN, F.; CATTOLICA, R. Velocity distribution function near the leading edge of a flat plate. **AIAA Journal**, v.12, n.9, p. 1247–1253, 1974. 67, 74

BERGEMANN, F.; BOYD, I. D. Rarefied gas dynamics: theory and simulations: new discrete vibrational energy model for the direct simulation monte carlo method. [S.l.]: Eds. B. D. Shizgal and D. P. Weaver, Progress in Astronautics and Aeronautics, v. 158, 1994. 174–183 p. 54

BERTRAM, M. H.; WEINSTEIN, L. M.; CARY JR, A. M.; ARRINGTON, J. P. Heat transfer to wavy wall in hypersonic flow. **AIAA Journal**, v.5, n.10, p. 1760–1767, 1967. 25, 28

BERTRAM, M. H.; WIGGS, M. M. Effect of surface distortions on the heat transfer to a wing at hypersonic speeds. **AIAA Journal**, v.1, n.6, p. 1313–1319, 1963. 25, 28, 29

BIRD, G. A. Molecular gas dynamics. New York: Clarendon Press, Oxford, 1976. 37, 41, 46, 47, 48

_____. Rarefied gas dynamics: monte carlo simulation in an engineering context. New York: Ed. S.S.Fisher, AIAA, v. 74, part I, 1981. 239–255 p. 43

_____. Definition of mean free path for real gases. Physics of Fluids, v. 26, n.11, p. 3222–3223, 1983. 59

_____. Direct simulation of high-vorticity gas flow. Physics of Fluids, v. 30, n.2, p. 364–366, 1987. 39

_____. Rarefied gas dynamics: theoretical and computational techniques: perception of numerical method in rarefield gas dynamics. Washington, DC: Eds. E.P.Muntz and D.P.Weaver and D.H.Capbell, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, v. 118, 1989. 374–395 p. 42, 47

_____. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. New York: Clarendon Press, Oxford, 1994. 37, 38, 39, 41, 48, 54, 59, 60, 64, 69

_____. The DS2G program user's guide. N.S.W. Killara, Australia: G.A.B. Consulting Pty Ltd, 1999. 66

BORGNAKKE, C.; LARSEN, P. Statistical collision model for monte carlo simulation of polyatomic gas mixture. Journal of Computational Physics, v. 18, p. 405–420, 1975. 53, 59

BOYD, I. D. Analysis of rotational nonequilibrium in standing shock waves of nitrogen. **AIAA Journal**, v. 28, n. 11, p. 1997–1999, 1990. 53

_____. Monte carlo study of vibrational relaxation process. In: INT. SYMPOSIUM ON RAREFIED GAS DYNAMICS, 17., 1990, Arcachon. **Proceedings...** Germany: Beylich, A.E, VCH, 1990. p. 792–799. 54

_____. Rotational and vibrational nonequilibrium effects in rarefied hypersonic flow. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v. 4, n.4, p. 478–484, 1990. 53

_____. Rotational-translational energy transfer in rarefied nonequilibrium flows. **Physics of Fluids**, v. A2, n.3, p. 447–452, 1990. 53

_____. Analysis of vibrational-translational energy transfer using the direct simulation monte carlo method. **Physics of Fluids**, v. A3, n.7, p. 1785–1791, 1991. 54

BOYD, I. D.; CHEN, G.; CANDLER, G. V. Prediction failure of the continuum fluid equations in the transition hypersonic flows. **Physics of Fluids**, v.7, n.1, p. 210–219, 1995. **3**5

BURNETT, D. The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas. **Proc. London Math. Soc.**, London, p. v.40, 382–435, 1935. 35

CAMUSSI, R.; FELLI, M.; PEREIRA, F.; ALOISIO, G.; MARCON, A. D. Statistical properties of wall pressure fluctuations over a forward-facing step. **Physics of Fluids, v. 20**, 2008. 28, 30, 90, 94

CERCIGNANI, C. The boltzmann equation and its applications. New York: Springer-Verlag, 1988. 36, 37, 58

CERCIGNANI, C.; FREZZOTTI, A. **Rarefied gas dynamics**: theoretical and computational techniques, progress in astronautics and aeronautics. Washington: AIAA, 1989. 552–566 p. 67, 74, 81

CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. The mathematical theory of non-uniform gases. London: Cambridge University press, 1970. 35

CHAPMANN, D. R.; KUEHN, D. M.; LARSON, H. K. Investigation of separeted flows in supersonic and subsonic streams with emphasis on the effect of transition. S.I: NACA, 1958. Report 1356. 105

CHENG, H. K.; EMANUEL, G. Perspective on hypersonic nonequilibrium flows. AIAA Journal, v.33, n.3, p. 385–400, 1995. 36

COMEAUX, K. A.; MACCORMACK, R. W.; CHAPMAN, D. R. An analysis of the burnett equations based on the second law of thermodynamics. In: AIAA AEROSPACE SCIENCE MEETING AND EXHIBIT, JANUARY 9 - 12, 33., 1995. **Proceedings...** Reno, NV: AIAA. p. 0415. 35, 36

CURRIE, I. Fundamental mechanic of fluids: diferent measures of boundary layer thickness. Toronto: University of Toronto, 1993. 318–319 p. 89

DIETRICH, S. Efficient computation of particle movement in 3-d dsmc calculations on structured body-fitted grids. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON RAREFIED GAS DYNAMICS, JULY 8 - 14, 17., 1990, Aachen. **Proceedings...** Germany: Edited by Beylich, A.E., 1990. p. 745–752. 41

D.I.PULLIN; J.K.HARVEY. Direct simulation calculations of the rarefield flow past a forward-facing step. AIAA Journal, v. 15, n.1, p. 124–126, January 1977. 28, 29, 144, 145

EVERHART, J. L.; ALTER, S. J.; MERSKI, N. R.; WOOD, W. A. Pressure gradient effects on hypersonic flow heating. In: AIAA AEROSPACE SCIENCES MEETING AND EXHIBIT, 44., 2006. **Proceedings...** [S.l.]: AIAA, 2006. p. 0185. 25, 26, 27, 28, 57

FISCKO, K. A.; CHAPMAN, D. R. Hypersonic shock structure with burnett terms in the viscous stress and heat transfer. AIAA Thermophysics,
Plasmadynamics and Lasers Conference, AIAA Paper, San Antonio, Texas,
p. 2733, June 27-29 1988. 35, 36

_____. **Rarefied gas dynamics**: theoretical and computational techniques. Washington, DC: AIAA, 1989. 374–395 p. 35, 36

GAI, S.; MILTHORPE, J. F. Hypersonic high-enthalpy flow over a blunt-stepped cone. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SHOCK WAVES, 20., 1995. **Proceedings...** Germany: Edited by Sturtevant, B. and Shepherd, J.E and Hornung, H.G, v.1, 1995. p. 234–244. 27, 28, 30, 57

GROTOWSKY, I. M. G.; BALLMANN, J. Numerical investigation of hypersonic step-flows. Shock Waves, v.10, p. 57–72, 2000. 25, 28, 30, 57

HAHN, M. Experimental investigation of separated flow over a cavity at hypersonic speed. **AIAA Journal**, v.7, n.6, p. 1092–1098, 1969. 25, 28

HARVEY, J. K. **Rarefied gas dynamics**: Thermophysical aspect of re-entry flows. Washington, DC: s.n. 25–43 p. 37

_____. A review of a validation exercise on the use of the dsmc method to compute viscous/inviscid interactions in hypersonic flow. **AIAA Paper**, p. 3643, 2003. 37

HARVEY, J. K.; GALLIS, M. A. Review of code validation studies in high-speed low-density flows. Journal of Spacecraft and Rockets, v. 37, n.1, p. 8–20, 2000. 37

HASH, D. B.; HASSAN, H. A. Direct simulation with vibration-dissociation coupling. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v. 7, n.4, p. 680–686, 1993. 54

HASH, D. B.; MOSS, J. N.; HASSAN, H. A. Direct simulation of diatomic gases using the generalized hard sphere model. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v. 8, n.4, p. 758–764, 1994. 46

HASSAN, H. A.; HASH, D. B. A generalized hard-sphere model for monte carlo simulation. **Physics of Fluids**, v. A5, n.3, p. 738–744, 1993. 46

HAVILAND, J. K. In method of computational physics: the solution of two molecular flow problems by the monte carlo method. New York: Eds. B. Alder and S. Fernbeck and M. Rotenberg, v.4 - Academic Press, 1965. 109–209 p. 37

HAVILAND, J. K.; LAVIN, M. L. Application of monte carlo method to heat transfer in rarefied gases. **Physics of Fluids**, v.5, p. 1399–1405, 1962. 37

HERMINA, W. L. Monte carlo simulation of rarefied flow along a flat plate. Journal Thermophysics and Heat Transfer, v.3, n.1, p. 7–12, 1989. 67, 74, 75, 81

HINDERSKS, M.; RADESPIED, R. Investigation of hypersonic gap flow of a reentry nosecap with consideration of fluid structure interaction. In: AIAA
AEROSPACE SCIENCES MEETING AND EXHIBIT, 44., 2006. Proceedings...
[S.l.]: AIAA, 2006. p. 0188. 25, 27, 28, 57

HOLDEN, M. S.; WADHAMS, T. P. A review of experimental studies for dsmc and navier-stokes code validation in laminar regions of shock/shock and shock/boundary layer interaction including real gas effects in hypersonic flows. **AIAA Paper**, p. 3641, 2003. **3**7

HOZUMI, K.; KOYAMA, T.; HIRABAYASHI, N. Experimental study on hypersonic heating characteristics of cavity wake flow. In: INTERNATIONAL CONGRESS OF THE AERONAUTICAL SCIENCES, 24., 2004, Japan. **Proceedings...** Yokohama: AIAA, 2004. 27, 28, 57

HURLBUT, F. C. Monte carlo simulation of rarefied flow along a flat plate. Journal Thermophysics and Heat Transfer, v.3, n.1, p. 7–12, 1989. 79, 81

_____. Sensitivity of hypersonic flow to wall/gas interaction models using dsmc. Journal Thermophysics and Heat Transfer, v. 3, n.4, p. 374–379, 1989. 67

JACKSON, A. P.; HILLIER, R.; SOLTANI, S. Experimental and computational study of laminar cavity flows at hypersonic speeds. Journal of Fluid Mechanics, v.427, p. 329–358, 2001. 27, 28, 57

JAKUBOWSKI, A. K.; LEWIS, C. H. Experimental study of supersonic laminar base flow with and without suction. **AIAA Journal**, v.11, n.12, p. 1670–1677, 1973. 25, 28, 29

KANNENBERG, K. C.; BOYD, I. Strategies for efficient particle resolution in the direct simulation monte carlo method. Journal of Computational Physics, v.157, p. 727–745, 2000. 65

KOURA, K.; MATSUMOTO, H. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law of lennard-jones potential. **Physics of Fluids**, v. A3, n.10, p. 2459–2465, 1991. 41, 46, 47

_____. Variable soft sphere molecular model for air species. **Physics of Fluids**, v. A4, n.5, p. 1083–1085, 1992. 46

KUNC, J. A.; HASSAN, H. A.; HASH, D. B. The ghs interaction model for strong attractive potentials. **Physics of Fluids**, v. 7, n.3, p. 1173–1175, 1995. 46

LAUX, M. Optimization and parallelization of the dsmc method on unstructured grids. In: AIAA THERMOPHYSICS CONFERENCE, JUNE 23-25, 32., 1997, Atlanta. **Proceedings...** USA: Edited by AIAA. p. 2512. 41

LEE, C. J. Unique determination of solutions to the burnett equations. **AIAA** Journal, v.32, n.5, p. 985–990, 1994. 35, 36

LEE, G.; CHANDRA, S. Numerical analysis of heat transfer enhancement from surfaces with cavities. In: AIAA AEROSPACE SCIENCES MEETING AND EXHIBIT, 44., 2006, Reno, Nevada. **Proceedings...** Reno: AIAA, 2006. p. 0186. 28

LORD, R. Application of the cercignani-lampis scattering kernel to direct simulation monte carlo methodd. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON RAREFIED GAS DYNAMICS, JULY 8 - 14, 17., 1990, Aachen. **Proceedings...** Germany: Edited by Beylich, A.E., 1991. p. 1427–1433. 79

_____. Rarefied gas dynamics: space science and engineering, progress in astronautics and aeronautics. s.l: AIAA, 1994. 221–228 p. 67, 75, 79, 81

LUMPKIN III, F. E.; CHAPMAN, D. R. Accuracy of the burnett equations for hypersonic real gas flows. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v.6, n.3, p. 419–425, 1992. 35, 36

LUMPKIN III, F. E.; HAAS, B. L.; BOYD, I. D. Resolution of differences between collision number definitions in particle and continuum simulations. **Physics of Fluids**, v. A3, n.9, p. 2282–2284, 1991. 54

MACHADO, H.; DANTON; BOAS, J. Cálculo da pressão em superfícies sujeitas a aquecimento aerodinâmico. In: BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL SCIENCES AND ENGINEERING, 11., 2006, Curitiba. **Proceedings...** Rio de Janeiro: Brazillian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 2006. 62

MORGENSTERN JR, A.; CHOKANI, N. Hypersonic flow past open cavities. AIAA Journal, v.32, n.12, p. 2387–2393, 1994. 25, 28, 30

NANBU, K. **Rarefied gas dynamics**: theoretical basis of the direct simulation monte carlo method. Stuttgard, Germany: Eds. V. Boffi and C. Cercignani, v.1, 1986. 369–383 p. 41, 47

NANCE, R. P.; WILMOTH, R. G.; HASSAN, H. A. Comparison of grid-definition schemes for monte carlo simulations. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v.11, n.2, p. 296–303, 1997. 41, 64

NESTLER, D. E. An experimental study of hypersonic cavity flow. Journal of Spacecraft and Rockets, v.19, n.3, p. 195–196, 1982. 25, 28

NESTLER, D. E.; SAYDAH, A. R.; AUXER, W. L. Heat transfer to steps and cavities in hypersonic turbulent flow. **AIAA Journal**, v.7, n.7, p. 1368–1370, 1969. 25, 28

OLYNICK, D. P.; MOSS, J. N.; HASSAN, H. A. Grid generation and adaptation for the direct simulation monte carlo method. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, v.3, n.4, p. 368–373, 1989. 63

RAULT, D. F. G. Aerodynamic of the shuttle orbiter at high altitude. Journal of Spacecraft and Rockets, v.31, n.6, p. 944–952, 1994. 63

RIEFFEL, M. A. A method for estimating the computational requirements of dsmc simulations. Journal of Computational Physics, v.149, p. 95–113, 1999. 65

ROM, J.; SEGINER, A. Laminar heat transfer to a two-dimensional backward facing step from the hight-enthalpy supersonic flow in the shock tube. **AIAA Journal**, v. 2, n.2, p. 251–255, february 1964. 28, 29

ROWLEY, C. W.; WILLIAMS, D. R. Dynamics control of high-reynolds-number flow over open cavities. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.38, p. 251–276, 2006. 28

SCHERBERG, M. G.; SMITH, H. E. An experimental study of supersonic flow over a rearward facing step. **AIAA Journal**, v. 5, n.1, January 1967. 28, 29

SHANKAR, P. N.; DESHPANDE, M. D. Fluid mechanics in the driven cavity. Annual Review of Fluid Mechanics, v.32, p. 93–136, 2000. 28

SHU, C.; MAO, X.; Y.T.CHEW. Particle number per cell and scalling factor effect on accuracy of dsmc simulation of micro flows. International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow, v.15, n.8, Singapore, p. 827–841, 2005. 39, 65

TANNEHILL, J. C.; EISLER, G. R. Numerical computation of the hypersonic leading edge problem using the burnett equations. **Physics of Fluids**, v.19, n.1, p. 09–15, 1976. 35, 36

WILMOTH, R. G.; LEBEAU, G. J.; CARLSON, A. B. Dsmc grid methodologies for computing low-density, hypersonic flows about reusable launch vehicles. In: AIAA THERMOPHYSICS CONFERENCE, 17-20 JUNE, 31., 1996, New Orleans. **Proceedings...** Lousiana: Edited by AIAA Paper. p. 1812. 41, 64

ZDANSKI, P. S. B.; ORTEGA, M. A.; FICO JR, N. G. C. R. Heat transfer on shallow cavities: Aspect ration and reynolds number influence. In: APPLIED AERODYNAMICS CONFERENCE AND EXHIBIT, 22., 2004, Providence. **Proceedings...** Rhode Island: Edited by AIAA Paper, 2004. p. 4961. 28

ZHONG, X.; MCCORMACK, R. W.; CHAPMAN, D. R. Stabilization of the burnett equations and application to hypersonic flows. **AIAA Journal**, v.31, n.6, p. 1036–1043, 1993. 35, 36

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programas de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnicocientíficos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constam destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. Aceitam-se tanto programas fonte quanto os executáveis.