

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Simulação numérica do fluxo de gás rarefeito ao redor de micro e nano partículas sólidas e esféricas causado por efeitos de evaporação e condensação na superfície

Vinícius Braga Leite¹Denize Kalempa²

Departamento de Ciências Básicas e Ambientais, EEL-USP, Lorena, SP

Resumo

Apesar de várias décadas de pesquisa sobre os fenômenos de evaporação e condensação na superfície, esses fenômenos ainda não são bem compreendidos [1]. As equações da mecânica dos meios contínuos, equações de Navier-Stokes (NS), largamente utilizadas nas áreas de engenharia, nem sempre descrevem corretamente os fenômenos de não-equilíbrio como evaporação e condensação de um meio gasoso. Essas equações são válidas nas situações que o número de Knudsen, K_n e definido como a razão entre o livre caminho médio molecular e um comprimento característico do sistema em estudo, é pequeno, ou seja, em situações em que o grau de rarefação do gás é muito baixo e o meio pode ser considerado contínuo. Mas, mesmo quando o número de Knudsen é pequeno, uma pequena camada (camada de Knudsen) existe na interface entre o líquido e a fase gasosa. Portanto, a implementação de métodos baseados na teoria cinética dos gases [2] são indispensáveis para descrever corretamente os fenômenos que ocorrem durante a evaporação e condensação. O presente trabalho busca simular numericamente os fenômenos de condensação e evaporação na superfície de uma gota esférica da fase condensada do gás.

Considerou-se um gás ao redor de uma gota esférica, de raio R_0 da sua fase condensada à temperatura constante T_w . Longe da gota esférica o gás está em estado de equilíbrio (pressão p_0 , temperatura T_0). O objetivo é investigar a evaporação e condensação na fase condensada esférica assumindo que:

- (i) O comportamento do gás é descrito pelo modelo proposto por Shakhov [4] para equação linearizada de Boltzmann.
- (ii) A fração α das moléculas emitidas da superfície da partícula é evaporada em condições de equilíbrio, enquanto a fração $(1 - \alpha)$ é refletida da superfície de acordo com a lei da difusividade com completa acomodação de temperatura. As velocidades das moléculas refletidas são distribuídas de acordo com a lei de Maxwell.

¹vinicius.bl@alunos.eel.usp.br²kalempa@usp.br

- (iii) Os parâmetros $\nu = |n_s - n_0|/n_0$ e $\tau = |T_s - T_0|/T_0$ são tão pequenos que podemos linearizar a equação cinética e suas condições de contorno ao redor do estado de equilíbrio em repouso, longe da esfera, com densidade n_0 e temperatura T_0 . n_s e T_s são a densidade de saturação e temperatura da fase condensada.

A equação cinética linearizada com suas condições de contorno foram resolvidas pelo método da velocidade discreta (DVM). A velocidade hidrodinâmica do gás evaporado na superfície pode ser encontrada como segue $2u_r = G_\nu \nu_s$. Os resultados numéricos para o coeficiente G_ν são apresentados na tabela 1 para diversos parâmetros de rarefação do gás. A comparação dos resultados com aqueles apresentados na Ref. [3] mostrou boa concordância.

Tabela 1: Valores de G_ν dependendo do parametro de rarefação δ e do coeficiente de evaporação α

δ	α						
	0.1	0.2	0.4	0.5	0.7	0.8	1.0
0.01	0.0562	0.112	0.225	0.281	0.394	0.450	0.563
0.05	0.0562	0.113	0.226	0.283	0.397	0.454	0.569
0.1	0.0563	0.113	0.227	0.284	0.400	0.458	0.576
0.3	0.0565	0.114	0.230	0.290	0.411	0.473	0.600
0.5	0.0567	0.114	0.233	0.295	0.421	0.486	0.620
0.7	0.0568	0.115	0.236	0.298	0.429	0.496	0.637
1.0	0.0570	0.116	0.239	0.303	0.439	0.510	0.659
2.0	0.0573	0.117	0.245	0.314	0.462	0.541	0.713

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (processo FAPESP 2016/09118-2).

Referências

- [1] G. A. Bird, Molecular Gas Dynamics, NASA STI/Recon Technical Report A, vol. 76, 128-250, (1976).
- [2] C. Cercignani, The Boltzmann equation and its application, Springer-Verlag, New York, vol.1, 40-103, (1988).
- [3] V. Chernyak and A. Ye. Margilevskiy, The Kinetic Theory of Heat and Mass transfer from a spherical particle in a rarefied gas, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 32, 2127-2134,(1989).
- [4] E. M. Shakhov, Generalization of the Krook Kinetic Relaxataion Equation, Fluid Dynamics, vol. 3, 95-96, (1968).