

# Sinopse de Modelos e Aplicações de Simulação Monte Carlo em Dinâmica de Gases Rarefeitos

Wilson J. Vieira

Instituto de Estudos Avançados, Caixa Postal 6044, 12228-970 – São José dos Campos, SP

**Resumo** — Este artigo apresenta características dos métodos Monte Carlo relacionados à dinâmica dos gases rarefeitos. A evolução dos computadores permitiu simulações microscópicas que se tornaram as principais ferramentas de cálculo para gases rarefeitos. Diferentemente das equações de Navier-Stokes, a característica principal destes métodos é a simulação de moléculas utilizando distribuições de probabilidades. Outra característica é a grande capacidade de tratar geometrias complexas. Além da aplicação na reentrada de veículos espaciais, estes métodos são utilizados na simulação da fabricação de Micro-Nano Eletro-Mechanical Systems, onde, por causa da grande redução das dimensões, os fenômenos envolvidos passam a pertencer à região de gases rarefeitos.

**Palavras-chaves** — Dinâmica de gases rarefeitos; métodos Monte Carlo; nanotecnologia.

## I. INTRODUÇÃO

Este artigo apresenta características dos métodos de cálculo Monte Carlo utilizados para a solução de problemas relacionados à dinâmica dos gases rarefeitos [1]. Por causa do aumento significativo da capacidade computacional e da disponibilidade destes computadores, as aplicações de Simulação Monte Carlo ou simulações no nível microscópico ou molecular tornaram-se as principais ferramentas de cálculo de parâmetros de problemas de gases rarefeitos.

A característica principal destes métodos é a simulação de partículas utilizando distribuições de velocidade, de energia, de probabilidades de interação, etc, diferentemente da solução das equações de Navier-Stokes que são equações diferenciais oriundas das equações de conservação. Outra característica destes métodos é a capacidade de tratar geometrias complexas sem aumentar demasiadamente o esforço computacional.

Embora estes métodos tenham sido desenvolvidos originariamente para solução de problemas de reentrada atmosférica, as características mencionadas acima promoveram a utilização destes métodos em outras áreas, como por exemplo, na fabricação de Micro Eletro-Mechanical Systems (MEMS) e em aplicações de Nanotecnologia. Por causa da grande redução das dimensões, os fenômenos envolvidos passam a pertencer à região de gases rarefeitos. Desta forma, surgiram novos problemas com grandes números de Knudsen ( $Kn$ ) [2], como por exemplo: simulação de micro e nano fluxos em processamento de metais, processos na escala nanométrica, abrasão, sedimentação, e outros.

W. J. Vieira, wjvieira@ieav.cta.br, Tel +55-12-3947-5478, Fax +55-12-3944-1177.

## II. COMPARAÇÕES COM OUTRAS METODOLOGIAS

Na região de números de Knudsen ( $Kn$ ) menores que  $0,1$  as soluções das equações diferenciais de Navier-Stokes têm grande vantagem computacional, pois são originárias das equações de conservação que consideram o gás como um meio contínuo, portanto suas variáveis são macroscópicas: velocidade, pressão, densidade e temperatura. A descrição microscópica da um gás é feita pela equação de Boltzmann. Entretanto, a complexidade dos problemas pode dificultar demasiadamente as soluções analítico-numéricas convencionais desta equação. Por esta razão a simulação Monte Carlo dos fenômenos físicos microscópicos diminuem consideravelmente a complexidade matemática. No entanto, a grande vantagem da Simulação Monte Carlo está em problemas de gases rarefeitos, pois mesmo que algumas soluções tenham sido obtidas dentro do regime de validade das equações de Navier-Stokes, a simulação Monte Carlo se torna impraticável para  $Kn \ll 1$ .

Por causa da importância crescente de problemas de altos valores de  $Kn$ , têm surgido novos algoritmos computacionais e também novos detalhamentos e aproximações teóricas em diversas faixas de números de Knudsen. Por exemplo, um método mais simples, mas de importância crescente é o chamado “Lattice Boltzmann” [3] que tem fornecido excelentes resultados para números de Mach menores que  $0,2$  e  $Kn < 0,2$ .

A Seção III trata-se de um resumo da Simulação direta por Monte Carlo, que é um conjunto de técnicas de Monte Carlo aplicadas na simulação de gases no regime de transição. A Seção IV mostra um breve sumário das aplicações deste método.

## III. SIMULAÇÃO DIRETA MONTE CARLO (DSMC)

Este método foi desenvolvido por G. A. Bird [1] e tem sido aprimorado desde então. O método é baseado na Teoria Cinética dos Gases e nos Métodos de Monte Carlo desenvolvidos para o transporte de radiação [4]-[5]. Uma das características essenciais do método de Bird foi o desacoplamento do transporte e das colisões de moléculas neste problema tipicamente não-linear. Para isto, as moléculas são transportadas deterministicamente por um tempo menor que o tempo médio entre colisões. Outra característica deste método é a utilização de células com dimensões que garantam colisões entre moléculas vizinhas. Estas condições limitam o método aos gases rarefeitos, não podendo ser aplicado em plasmas altamente ionizados por causa das interações de longa distância.

O tratamento microscópico facilita a utilização de efeitos físicos complexos como reações químicas na simulação. De acordo com Bird a vantagem do método DSMC aumenta com a complexidade do fluxo. Isto significa que para muitos problemas reais da engenharia não existem métodos alternativos.

#### A. Amostragem do processo de colisão

1) *Metodologia de Bird [1]*: Duas moléculas iguais colidem entre si quando a distância entre seus centros é menor que seus diâmetros  $d$ . Portanto, a seção de choque total de colisão é dada por:

$$\sigma_T = \pi d^2 \quad (1)$$

Considere  $nV_c$  moléculas em uma célula de volume  $V_c$  (de dimensões da ordem de um livre caminho médio) e densidade molecular  $n$ . Uma molécula com velocidade relativa  $c_r$  e seção de choque de interação  $\sigma_T$ , tem probabilidade de colisão em um intervalo  $\Delta t$  (menor que o intervalo médio entre colisões) igual ao volume varrido pela seção de choque na velocidade relativa e o volume da célula como pode ser visto na Fig. 1.

$$P_1 = \frac{\sigma_T c_r \Delta t}{V_c} \quad (2)$$

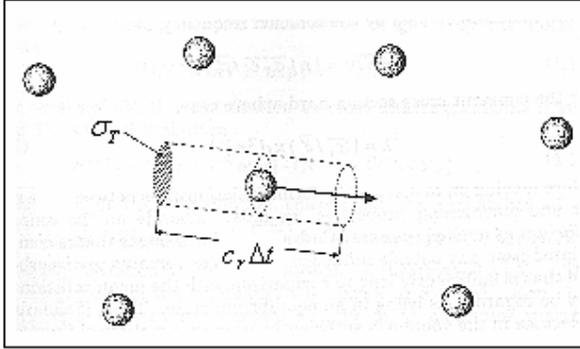


Fig. 1. Esquema ilustrativo para cálculo da probabilidade de colisão. Figura retirada de [1].

Esta equação representa uma razão de volumes extremamente pequena. Para aumentar a eficiência computacional, o método representa um número  $F_N$  de moléculas reais por cada molécula simulada. Portanto,  $10^{20}$  moléculas reais poderiam ser representadas por 100 moléculas simuladas e  $F_N$  seria igual a  $10^{18}$ . A probabilidade de interação neste caso será:

$$P = \frac{F_N \sigma_T c_r \Delta t}{V_c} \quad (3)$$

Considerando que agora temos  $N$  moléculas, isto significa que são possíveis  $N(N-1)/2$  colisões e a probabilidade de cada uma é dada por (3). No entanto, esta probabilidade é ainda muito pequena, o que torna a simulação ineficaz. Para solucionar este problema, Bird [1] escalou (3) fazendo a maior probabilidade na célula igual à unidade:

$$P_{\max} = \frac{F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t}{V_c} \equiv 1 \quad (4)$$

Desta forma, o número de colisões possíveis é escalado para

$$\frac{N(N-1)F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t}{2V_c} \equiv \frac{N\bar{N}F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t}{2V_c} \quad (5)$$

Onde  $\bar{N}$  é o número médio de moléculas simuladas na célula. A probabilidade de colisão modificada é dada por

$$P = \frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{\max}} \quad (6)$$

As colisões amostradas são tratadas através dos modelos moleculares descritos por Bird [1], isto é, os modelos da esfera rígida (HS), da esfera variável rígida (VHS), da esfera variável mole (VSS), ou o modelo generalizado da esfera rígida (GHS).

2) *Metodologia de Matthes [6]*: Este procedimento considera que a equação de Boltzmann é invariante sob a transformação

$$n = \lambda n^* \quad (7)$$

e

$$\sigma_T^* = \lambda \sigma_T \quad (8)$$

Onde  $\lambda$  é uma constante. Portanto, o problema real com  $n$  grande e  $\sigma_T$  pequena é modificado para um problema equivalente com  $n^*$  pequeno e  $\sigma_T^*$  grande.

O tempo médio entre colisões  $\tau$  no caso real é dado por

$$\tau = 1/(n(n-1)/2) \approx 2/n^2 \quad (9)$$

Para o caso modificado

$$\tau^* = 2\lambda/n^2 = \lambda\tau \quad (10)$$

Portanto, usando  $\tau^*$  estaremos garantindo em média apenas uma colisão, em vez de  $\lambda\tau$  colisões do caso real. A nova probabilidade de colisão é dada por [7]

$$P = \frac{\sigma_T c_r}{\sum_i^n \sigma_T c_r} \quad (10)$$

O problema passa a ter solução similar à [1]. As grandezas macroscópicas são calculadas com a transformação inversa.

Os modelos acima foram baseados na teoria cinética clássica para o tratamento de gases reais, mas podem ser adaptados para tratar aspectos dos gases reais: energia rotacional, energia vibracional, reações químicas, moléculas poliatômicas, dissociação, recombinação, ionização, etc.

#### B. O transporte das moléculas

Na ausência de campos elétrico-magnéticos o transporte espacial das moléculas é feito simplesmente pela fórmula do

movimento uniforme. Durante o intervalo  $\Delta t$ , a molécula em uma posição  $x$  é transportada na direção inicial (ou após a colisão) para ocupar uma nova posição geométrica na célula,  $x + c_x \Delta t$  e sua velocidade pode ser mudada de  $c_x$  para  $c_x + (F/m)\Delta t$ , se uma força  $F$  atuar em uma molécula de massa  $m$ .

Uma vez atualizadas as posições das moléculas, retorna-se à amostragem das colisões. Portanto, o cálculo consiste de uma seqüência de procedimentos da simulação transporte-colisão até atingir o regime estacionário. No caso de problemas não-estacionários a convergência é obtida a partir de médias de diversas soluções (amostras).

### C. Inferência dos parâmetros macroscópicos

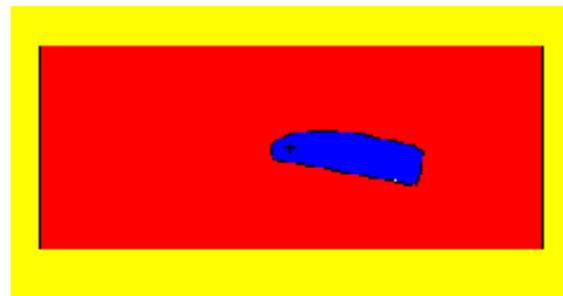
A simulação dos processos microscópicos de transporte e colisão de moléculas pode fornecer valores médios no centro e nas superfícies das células para diversas grandezas macroscópicas. As densidades são inferidas utilizando o fator  $F_N$ . A temperatura e o fluxo de calor são relacionados à energia cinética das partículas e às velocidades. Outras grandezas também podem ser inferidas das variáveis microscópicas, como por exemplo, os coeficientes de pressão, de transferência de calor, de arrasto e de fricção [8]-[10].

### D. Novos desenvolvimentos em DSMC

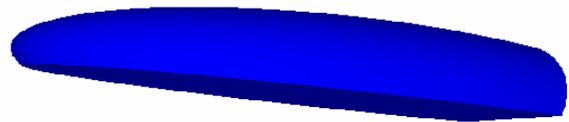
Vários aspectos têm contribuído para o desenvolvimento das aplicações de DSMC. Em primeiro lugar é importante reconhecer que os aumentos na velocidade e capacidade de memória dos computadores aumentaram significativamente o alcance do método. Além disto, novos sistemas operacionais com processamento paralelo e programas gráficos para entrada de dados e visualização de resultados também contribuíram significativamente para o desenvolvimento de novas aplicações do método bem como de obtenção de soluções de forma mais rápida e segura.

Do ponto de vista do método houve grandes avanços em técnicas de discretização espacial e temporal. Vários programas de “meshing” ou “gridding” extremamente eficazes podem ser acoplados com DSMC. A Fig. 2 mostra um exemplo simples de um “glider” [11], porém modelado em geometria tri-dimensional no programa MCNP[12]. Trata-se de um elipsóide cortado por um plano em um ângulo de reentrada. Utilizando o acoplamento DSMC/MCNP este exemplo foi simulado [7] para cálculo dos perfis de velocidade e de temperatura de um fluxo de moléculas.

Outro grande desenvolvimento dos métodos Monte Carlo é a utilização de discretização do problema em volumes variáveis, que são redimensionados à medida que os cálculos avançam e as regiões vão mudando suas características físicas. Isto causa a otimização das dimensões das células para evitar o problema de alta estatística, que aumenta desnecessariamente o tempo de processamento, e o problema de baixa estatística, que leva a uma amostragem insuficiente e a respostas erradas. Nesta mesma linha de desenvolvimentos é possível utilizar soluções aproximadas em uma ou duas dimensões das equações de Navier-Stokes para serem utilizadas como distribuições iniciais [2] em cálculos DSMC. Esta técnica diminui significativamente o tempo computacional para convergência da solução DSMC.



(a) Corte bidimensional



(b) Visão tridimensional

Fig. 2. Esquema simplificado de um “glider” [3] em reentrada atmosférica modelado no programa MCNP.

Outra vertente de desenvolvimentos acontece na área de implantação de algoritmos híbridos. É possível criar algoritmos que analisem o número de Knudsen e o grau de não-equilíbrio do problema para definir regiões onde são buscadas soluções diretas da equação de Boltzmann, ou de Navier-Stokes, ou DSMC, ou da simulação analítica dos fenômenos da dinâmica molecular. Considerando o caso da reentrada de um veículo espacial, é possível definir diferentes metodologias em diferentes altitudes e/ou em diferentes regiões do veículo. Por exemplo, Navier-Stokes na região do contínuo na frente do veículo e DSMC na região rarefeita atrás do veículo.

## IV. APLICAÇÕES DE DSMC

O desenvolvimento do método DSMC é oriundo das aplicações na reentrada de veículos espaciais. No entanto, simulações avançadas mais recentes tais como centrífugas de separação isotópica, asas rotatórias e motores a combustão são mostradas em [7]. Além disto, têm surgido aplicações em diversas áreas tecnológicas, onde vale ressaltar, na fabricação e aplicação de micro e nanosistemas [3].

### A. Aplicações em veículos espaciais

A obra de Bird [1] teve grande impacto no desenvolvimento de DSMC que teve o seu desenvolvimento inicial na área de veículos espaciais. Nesta obra podem ser encontrados os algoritmos e os problemas sobre os quais muitos outros pesquisadores iniciaram seus trabalhos desde a reentrada de corpos rombudos até veículos complexos manobrando em atmosfera rarefeita. Vários programas FORTRAN, com a implementação dos vários algoritmos e que acompanham [1], estão mostrados na Tabela I.

Na página da Internet [13], G. A. Bird Consulting, estão disponíveis programas executáveis com grande capacidade de visualização de grandezas macroscópicas e microscópicas

para ilustrar uma série de aplicações de DSMC. Nesta página da Internet pode-se citar especificamente o programa DSWT (DSMC Wind Tunnel) em duas dimensões com simetria axial, considerando mistura de gases, viscosidade, energia rotacional e modos vibracionais. Também inclui um modelo de reações químicas. Pode utilizar seção quadrada ou circular para o túnel. O programa mostra as estruturas de ondas de choque normais, perfis de velocidade, pressão e temperatura e permite a entrada de uma variedade de formas para os objetos dentro do túnel.

**TABELA I** PROGRAMAS FORTRAN FORNECIDOS EM [1].

Programa	Características do programa
DSMC0S.FOR	Teste de procedimentos colisionais em um gás uniforme simples.
DSMC0.FOR	Teste de procedimentos colisionais em uma mistura de gases simples.
DSMC0R.FOR	Teste da relaxação rotacional em um gás simples.
DSMC0V.FOR	Teste da excitação vibracional em um gás simples.
DSMC0D.FOR	Teste da dissociação e recombinação em um gás uniforme. Inicialmente o gás consiste de uma única espécie de moléculas diatômicas e homonuclear.
DSMC0F.FOR	Para o estudo da estatística das grandezas
DSMC1.FOR	Programa geral para cálculo de fluxos estacionários em uma dimensão.
DSMC1S.FOR	Programa para o estudo da estrutura de ondas de choque.
DSMC1T.FOR	Cálculo do fluxo em uma linha de estagnação. O fluxo supersônico consiste de uma única espécie de gás diatômico e homonuclear em dissociação.
DSMC1U.FOR	Programa geral para cálculo de fluxos não-estacionários em uma dimensão.
DSMC2.FOR	Programa geral para cálculo de fluxos estacionários em duas dimensões.
DSMC2A.FOR	Programa geral para cálculo de fluxos estacionários em duas dimensões e simetria axial.
DSMC3.FOR	Programa para cálculo de fluxos estacionários em três dimensões.

Uma compilação de trabalhos importantes em atmosfera rarefeita pode ser encontrada em [1] e [2]. Uma grande motivação é estender os limites do número de Knudsen para aplicação DSMC.

### B. Aplicações em crescimento de filmes finos e MEMS

Na fabricação de materiais utilizando o crescimento de filmes finos ocorre o transporte de precursores gasosos sobre um substrato onde cresce o filme. Nos casos de dimensões micro ou nanométricas e baixa densidade, o método DSMC é aplicado para simulação dos processos chamados CVD (Chemical Vapor Deposition) e PVD (Physical Vapor Deposition) [2].

A utilização e a fabricação de micro e nonosistemas podem incorrer em problemas de gases rarefeitos ou de altos  $Kn$ . Um exemplo desta condição é a simulação de microcanais e nanotubos.

## V. CONCLUSÕES

O método DSMC tem contribuído para a solução de diversos problemas científicos e tecnológicos relacionados à dinâmica de gases rarefeitos. É possível que em um futuro próximo possa haver programas de grande porte para o cálculo eficaz e facilitado de diversos destes problemas, assim como o programa MCNP está para problemas na área de transporte de partículas ionizantes. No entanto, a solução de problemas complexos necessita de grandes investimentos para a

capacitação de recursos humanos e para a disponibilização de recursos computacionais de grande capacidade. Além disto, é necessário grandes recursos laboratoriais para a realização de experimentos necessários para a aquisição de dados.

## REFERÊNCIAS

- [1] G. A. Bird, *Molecular Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, 1st ed., Oxford: Clarendon, 1994.
- [2] E. S. Oran, C. K. Oh, and B. Z. Cybyk, "Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications", *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 30, pp. 403-41, 1998.
- [3] D. Raabe, "Overview of the lattice Boltzmann method for nano- and microscale fluid dynamics in materials science and engineering", *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol 12, pp. R13-R46, 2004.
- [4] E. D. Cashwell and C. J. Everett, *A Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random Walk Problems*, New York, Pergamon Press, 1959.
- [5] L. L. Carter and E. D. Cashwell, *Particle Transport Simulation with the Monte Carlo Method*, Oak Ridge, Tennessee, ERDA Critical Review Series, 1975.
- [6] W. K. Matthes, "Simulation of relaxation processes by Monte Carlo", *Journal of Computational Physics*, vol 6, no. 2, pp.157-167, 1970.
- [7] W. K. Matthes, "Monte Carlo simulation of gas-flow using MCNP", *Annals of Nuclear Energy*, vol 32, no. 13, pp. 1495-1508, 2005.
- [8] F. Sharipov, "Hypersonic Flow of Rarefied Gas Near the Brazilian Satellite During its Reentry into Atmosphere", *Brazilian Journal of Physics*, vol 33, no. 2, pp. 398-405, 2003.
- [9] F. Sharipov, "Numerical simulation of rarefied gas flow through a thin orifice", *J. Fluid Mech*, vol 518, pp. 35-60, 2004.
- [10] W. F. N. Santos, "Leading-edge bluntness effects on aerodynamic heating and drag of power law body in low-density hypersonic flow", *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.*, vol 27, no. 3, pp. 236-42, 2005.
- [11] W. K. Matthes, "Private communication", 2006.
- [12] X-5 Monte Carlo Team, MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Versão 5, Los Alamos National Laboratory, April 24, 2003. (LA-CP-03-0245)
- [13] G. A. Bird, <http://www.gab.com.au>, last access in October 2006.