

XXXVII IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS
ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING
BRASÍLIA - DF - BRAZIL

IMPLEMENTATION OF GENERIC METHODOLOGY WITH SDPD IN PROBLEMS FOR MICROFLUIDIC DEVICES

Edgar Andres Patino-Narino

Hugo Sakai Idagawa

Luiz Otavio Saraiva Ferreira

eapatinon@fem.unicamp.br

idagawa@fem.unicamp.br

lotavio@fem.unicamp.br

University of Campinas

Rua Mendeleev, 200 Sala BE01, CEP 13083-860, Campinas, SP, Brazil

Abstract. *This paper proposes the formulation and application of classical hydrodynamics problem using GENERIC methodology in a solution based on the SPH. This meshless particle solution is called Smoothed Dissipative Particle Dynamics (SDPD), which simulate situations of micro-fluids in the mesoscopic flow scale. Furthermore, we implemented a surface-tension formulation for the Continuum Surface Force (CSF) method in bi-phase, commonly used for capillarity modelling applications in micro-device and micro-liquids. The validation of the simulator has been performed with the cases in Poiseuille Flow, Couette Flow, one single droplet impacting on a liquid film and bi-phase flows in microfluidic devices.*

Keywords: *Meshless, Microfluidic devices, Smoothed Dissipative Particle Dynamics.*

1 INTRODUÇÃO

A micro-fluídica é a ciência que estuda os sistemas que manipulam quantidades muito pequenas de fluido (10^{-8} a 10^{-9} litros), usando canais com dimensões micrométricas (de 10^{-5} a 10^{-4} metros). As aplicações em micro-fluidos são possíveis devido as seguintes vantagens:

- Pouco consumo de amostras e reativos químicos.
- Elevada resolução e sensibilidade.
- Baixo custo e tempos de análises curtos (Cheng et al., 1998).

Nos sistemas com micro-fluidos aproveitam-se dois atributos principais, a miniaturização e o fluxo laminar (geralmente com número de Reynolds menor de 100), o que permite um melhor controle do processo. Assim, tem uma destacada área de aplicação como os MEMS, as células de combustão, a recuperação de petróleo, os dispositivos de análise química e biológica e a biomedicina (Nisar et al., 2008; Cheng et al., 1998).

Além de considerar-se um fluxo laminar, as interações microscópicas e fenômenos como eletro-umedecimento, tensão superficial, rápido relaxamento térmico, cargas elétricas de superfície e a difusão, que normalmente são negligenciadas nos sistemas macroscópicos (Filipovic et al., 2008) tem um efeito importante na micro-fluídica. Assim, este trabalho se concentrará na inclusão de dois fenômenos: tensão superficial e flutuações térmicas.

1.1 Simulação de micro-fluidos

Os métodos tradicionais em mecânica dos fluidos computacionais (CFD) partem das equações da mecânica do contínuo. Porém, esse enfoque tem dificuldades para adicionar as interações microscópicas, que são essenciais na maioria dos casos de estudo da micro-fluídica. Além disso, as simulações na escala micro, como a Dinâmica Molecular (MD) (Anderson et al., 2008), estudam os comportamentos dos fluidos pela evolução das moléculas individuais que interagem entre si através das potencialidades inter-moleculares. Porém, a enorme necessidade de processamento computacional limita seu uso a escalas muito pequenas de espaço e tempo, inclusive com os supercomputadores mais avançados (Li et al., 2013).

Pelo fato das técnicas tradicionais de CFD e as simulações com MD não são muito adequadas para os micro-fluidos, os pesquisadores estão procurando cada vez mais uma série de relativamente novas técnicas que ofereçam a possibilidade de incluir parâmetros relevantes no espaço e na escala de tempo, entre os níveis atômico e macro. Portanto, um modelo desejável deverá ter um caráter multi-escalar que acoplará a parte do fluxo entre os estados microscópicos e macroscópicos (Hu and Adams, 2006; Litvinov et al., 2010).

Para superar este limitante, realizou-se o estudo na escala mesoscópica, tornando-se uma importante alternativa. Uma descrição na meso-escala tem que explicar corretamente o comportamento do fluido na meso e na macro escala. Para o fluido em meso escala, considera um conjunto de pequenas substâncias microscópicas, sendo esta aproximação conhecida como um estado granular grosso (Coarse-grained) (Espanol et al., 1997), para descrever o estado contínuo característico da macro escala. Da categoria de Coarse-grained, destacam-se os métodos baseados em partículas SPH (Monaghan, 2012; Hu and Adams, 2006) e DPD (Hoogerbrugge et al., 2007) sem malha, e

Lattice Boltzmann Method (LBM) (Sukop and Thorne, 2006) com malha.

É importante indicar que as técnicas de simulação em meso-escala ainda estão em uma etapa relativamente nova de desenvolvimento e aplicação, por ter entre uma e duas décadas de utilização. Não tendo atingido o mesmo estado de maturidade e estabilidade dos métodos de dinâmica molecular para o limite final da escala microscópica, e CFD no contínuo para o nível macroscópico (Quesada, 2010).

1.2 Método Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

Um método sem malha baseado em partículas, que é bem-sucedido nas simulações de problemas multi-escala e multi-fase em microcanais, é o (SPH). Este foi usado em suas origens em problemas de Astrofísica (Monaghan, 2012), sendo a metodologia básica do método SPH proposta inicialmente por Lucy (Lucy, 1977) e, Gingold e Monaghan em 1982 (Gingold and Monaghan, 1982). Atualmente, além dos problemas de astrofísica, é aplicada com êxito em problemas variados de CFD (Gomez-Gesteira et al., 2010) e mecânica de sólidos (Gray and Monaghan, 2003). Além disso, o método SPH já tem sido implementado em problemas de micro-fluidos alcançando algum sucesso integrando a tensão superficial e capilaridade, em simulação em gotas e micro-canais (Liu et al., 2007; Adami et al., 2010; Nugent and Posch, 2000).

No método SPH o fluido é representado por um grupo de partículas que interagem entre si, e onde as equações de Navier-Stokes são discretizadas e resolvidas nas posições de tais partículas usando um polinômio de interpolação conhecido como Kernel. Além de ser um modelo lagrangeano e não ser preciso definir uma malha entre suas partículas, é possível aplicar de forma natural as condições de fronteira, como superfícies livres, interface entre fluidos e paredes deformáveis (Sigalotti and López, 2008).

Portanto, as características que tornam o SPH um tema de pesquisa de interesse em mecânica computacional, e vantajoso sobre os métodos tradicionais de malha são:

- É mais adequado para solucionar problemas com superfície livres, fronteiras deformáveis, interfaces móveis e altas deformações que os métodos tradicionais de malha.
- Por ser o método de partículas sem malha mais antigo, seu desenvolvimento está mais maduro. Devido ao contínuo aprimoramento e desenvolvimento, a precisão, estabilidade e adaptabilidade tem atingido níveis aceitáveis para uso em um grande número de problemas práticos, desde micro-escala a macro-escala, e de sistemas discretos a sistemas contínuos.
- Computacionalmente por ser um método sem malha, o armazenamento das propriedades do modelo é menor. Isto ocorre porque armazena nas posições das partículas em vez de armazenar cada ponto do espaço como acontece com os métodos com malha. Assim, faz os cálculos somente quando são necessários e facilita o uso das técnicas de programação massivamente paralela (Crespo et al., 2011).

Porém, uma das limitantes que apresenta SPH é desconsiderar as flutuações térmicas, fundamentais na descrição de fluidos na meso-escala.

1.3 Smoothed Dissipative Particle Dynamics (SDPD)

Atualmente, tem-se desenvolvido um método de simulação chamado Smoothed Dissipative Particle Dynamics (SDPD) (Espanol and Revenga, 2003), o que melhora os métodos de DPD e SPH. Para o desenvolvimento de SDPD, emprega-se o formalismo termodinâmico denominado GENERIC (General Equation for the Nonequilibrium Reversible-Irreversible Coupling) (Ottinger and Grmela, 1997; Grmela and Öttinger, 1997), que estabelece o estado geral das equações de evolução de um sistema através das duas primeiras leis da termodinâmica e o teorema de flutuação-dissipação (Espanol and Revenga, 2003). Empregando esse formalismo termodinâmico se obtém um modelo geral do fluido usando partículas (Litvinov et al., 2010), esse transforma o modelo SPH quando definimos o volume segundo os parâmetros do método com a diferença que o uso de GENERIC fornece um guia para incluir as flutuações térmicas de maneira consistente (Espanol and Revenga, 2003; Hu and Adams, 2006). Portanto, SDPD tem as melhores qualidades dos dois modelos tanto de DPD como de SPH:

- Assim como no SPH pode-se escolher a equação de estado.
- Assim como no DPD adiciona-se flutuações térmicas. Estas flutuações térmicas se introduzem cumprindo o teorema de flutuação-dissipação de maneira automática (sem a necessidade de ajustar nenhum parâmetro) (Vázquez-Quesada et al., 2009).

Pode-se afirmar então que o modelo SDPD é um modelo SPH em que as flutuações térmicas são introduzidos de forma consistente (Quesada, 2010; Vázquez-Quesada et al., 2012). Desse modo, o trabalho apresenta a validação das implementações de SPH com a integração do formalismo GENERIC e Tensão superficial nos exemplos de fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette, uma gota colidindo uma película de líquido e escoamento de fluidos bi-fase em micro-cavidades.

2 Método SPH

Neste trabalho implementa-se o método SPH, mas pela complexidade deste estudo faz-se importante reformulá-lo para implementar elementos para a simulação no estado mesoscópico necessário para a modelagem do micro-fluido. Assim, as aproximações básicas para as derivadas espaciais média de partículas na reformulação são feitas a partir de uma função de suavização das partículas, sendo que as partículas vizinhas só contribuem para o volume específico, mas não para a densidade, como trabalha-se tradicionalmente no SPH. O algoritmo resultante pretende resolver discontinuidades nas densidades na interface das fases naturais e satisfazer a conservação de massa, empregando uma equação da somatória da densidade, usando as formulações dos trabalhos de S. Adami, X.Y. Hu e companhia (Adami et al., 2012; Hu and Adams, 2006).

Em primeiro lugar, termos viscosos são formulados para permitir uma discontinuidade na viscosidade e garantir a continuidade de velocidade e tensão de cisalhamento através da interface de fase. Com base nesta formulação, flutuações térmicas mesoscópicas são introduzidas de uma maneira simples (Litvinov et al., 2010; Espanol and Revenga, 2003). E em segundo lugar, um novo algoritmo capaz de lidar com três ou mais fases imiscíveis é desenvolvido para integrar os efeitos causados pela tensão superficial (Morris, 2000).

Para começar um requisito para a reformulação, vamos visualizar a equação diferencial de

movimento apresentada na Eq. 1.

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \mathbf{F}^{(\nu)} + \frac{\mathbf{F}^{(TS)}}{\rho} \quad (1)$$

Onde ρ , \mathbf{v} e \mathbf{g} são a densidade, velocidade e força no corpo, respectivamente. Sendo a Eq. 1 usada para a simulação de fluidos incompressíveis com um número de Reynolds baixo, usando equações de estado para calcular P , usando a Eq. 2 e a Eq. 3.

$$P = c^2 \rho \quad (2)$$

$$P = B_f \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad (3)$$

Nas Eq. 2 e Eq. 3, c é a velocidade do som, $B_f = \frac{c^2 \rho_0}{\gamma}$, γ é uma constante geralmente com valor igual a 7 e ρ_0 é a densidade inicial de referência do fluido.

Dessa forma, o termo $\mathbf{F}^{(\nu)}$ denota a força viscosa, que para o caso de escoamento incompressível é dado conforme a Eq. 4.

$$\mathbf{F}^{(\nu)} = \nu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (4)$$

Onde $\nu = \mu/\rho$ é a viscosidade cinética. O termo $\mathbf{F}^{(TS)}$ representa a força por tensão superficial que atua somente na interface ou na superfície do fluido. Para um fluido imiscível a força superficial é apresentada na Eq. 5.

$$\mathbf{F}^{(TS)} = \alpha (\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}}, \quad (5)$$

O termo α denota o coeficiente de tensão superficial, $\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{n}}$ são as curvas e direção da interface normalizada da superfície do fluido respectivamente. Note que a força do corpo, a pressão, e a força de superfície são forças conservativas. Dado que, os efeitos causados pela difusão no fluido são negligenciados, os efeitos dissipativos do modelo são devido unicamente às forças viscosas da Eq. 4.

Portanto, fazemos uma reestruturação das equações diferenciais que modelam nosso fluido, acrescentando a força causada pela tensão superficial e dividindo a equação de movimento em forças conservativas e não conservativas.

2.1 Evolução da densidade

A densidade média de uma partícula é $\rho_i = m_i/V_i$, sendo m_i e V_i a massa e o volume de uma partícula respectivamente. Assim, a Eq. 6 fornece a evolução do campo de densidades (Adami et al., 2010).

$$\langle \rho_i \rangle = m_i \sum_{j=1}^N W_{ij}, \quad (6)$$

Esta forma conserva exatamente a massa e é semelhante à aproximação de densidade, $\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}$, empregada mais recorrentemente no método SPH. A diferença da nova equação está

na aproximação fornecida pelas partículas vizinhas para a densidade da partícula, que somente é afetada pelo volume específico de partícula i .

Desse modo, como não há nenhuma contribuição na massa pelas partículas vizinhas, a Eq. 6 possibilita que existam densidades descontínuas, nos casos que apresentam-se grandes diferenças entre as massas de partículas próximas (Hu and Adams, 2006).

2.2 Equação de Momento

Na equação de momento da nova formulação o termo do gradiente de pressão é dado pela Eq. 7.

$$\left\langle \frac{d\mathbf{v}^{(P)}}{dt} \right\rangle = -\frac{1}{\rho} \nabla P = -\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N (P_i V_i^2 + P_j V_j^2) \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \boldsymbol{\eta}_{ij}, \quad (7)$$

Onde o termo $\frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \boldsymbol{\eta}_{ij} = \nabla_i W_{ij}$. Por outro lado, esta expressão tem forma anti-simétrica com respeito à interação de i e j , já que este termo gera uma relação de conservação de momento satisfatória (Hu and Adams, 2006).

A Eq. 7 é semelhante à forma referida pelo Monaghan (Monaghan, 1992). Uma comparação com (Flekkoy et al., 2000) na formulação do gradiente de pressão mostra que o termo $\sum_{j=1}^N (V_i^2 + V_j^2) \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \boldsymbol{\eta}_{ij}$ é equivalente à área eficaz da interface entre as partículas i e j .

Portanto, para a força viscosa $\mathbf{F}^{(\nu)}$ no escoamento de fluido incompressível é formulada como a Eq. 8 utilizando a Eq. 4.

$$\left\langle \frac{d\mathbf{v}^{(\nu)}}{dt} \right\rangle = \mathbf{F}^{(\nu)} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N \frac{2\eta_j \eta_i}{\eta_j + \eta_i} (V_i^2 + V_j^2) \frac{(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \quad (8)$$

2.3 Tensão Superficial

Fluidos múltiplos e a influência da tensão superficial em problemas de escoamento existem em muitos problemas de engenharia. Exemplos de tais fluxos incluem moldagem por injeção (Tong and Browne, 2014), soldagem (Liu and Liu, 2004), recuperação de petróleo, sistemas LOC's (Liu et al., 2007) e sistemas hidrotermais (Tripp and Vearncombe, 2004). Na interface de diferentes fluidos, a tensão superficial existe como um resultado das forças moleculares irregulares. Portanto, a interface se comporta de uma forma semelhante a uma membrana fina esticada. Assim, a previsão da evolução da interface e o tratamento das condições de interface entre fluidos têm sido uma tarefa difícil para simulações numéricas.

Portanto, uma alternativa é o emprego do modelo de força de superfície contínua (CSF) (Hu and Adams, 2006), a força de superfície na Eq. 5 é reescrito em forma do tensor $\mathbf{F}^{(TS)} = \nabla \cdot \Pi^{(TS)}$, onde o esforço superficial esta dado pela Eq. 9.

$$\Pi^{(TS)} = \alpha (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}) |\nabla C| \quad (9)$$

Dessa forma, ∇C é o gradiente de uma cor do índice de C , que está definido como uma unidade através da interface, e $\hat{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|}$. Devido ao fato de que $\mathbf{I} - \hat{n} \otimes \hat{n}$ tem um traço de $d - 1$, sendo d a dimensão espacial, há uma contribuição de pressão negativa $\frac{d-1}{d}\alpha |\nabla C|$ para o esforço superficial de acordo com a Eq. 1. Como esta pressão negativa não contribui em nada para a tensão superficial, é razoável reescrever a Eq. 9 como a Eq. 10 para eliminar esse efeito.

$$\Pi^{(TS)} = \alpha \left(\frac{1}{d} \mathbf{I} - \hat{n} \otimes \hat{n} \right) |\nabla C| \quad (10)$$

Outra razão para este procedimento foi proposto por Morris (Morris, 2000), que sugere que uma pressão negativa pode causar problemas de estabilidade no cálculo de alta resolução. Visto que $|\nabla C|$ é representada numericamente em uma interface com largura finita e que tende a zero, gerando erros no cálculo direto de \hat{n} . Uma recomendação para superar esta dificuldade foi resolvido reescrevendo a Eq. 10 como a Eq. 11, que é bem definida em todo o domínio e desaparece naturalmente quando $|\nabla C|$ torna-se zero.

$$\Pi^{(TS)} = \alpha \frac{1}{|\nabla C|} \left(\frac{1}{d} \mathbf{I} |\nabla C|^2 - \nabla C \nabla C \right) \quad (11)$$

Portanto, define-se o índice de cor como a Eq. 12.

$$C_i^S = \begin{cases} 1 & \text{Se partícula } i \text{ pertence à fase } s, \\ 0 & \text{Do contrário,} \end{cases} \quad s = 1, \dots, S \quad (12)$$

Sendo S uma fase ou tipo dos fluidos, $\sum_S C^S = 1$ e $S = 1$. O índice de cores de cada partícula não pode mudar através dos cálculos. Nota-se que a definição acima é também válida para misturas imiscíveis com três ou mais fases de fluidos. Portanto, obtêm-se a integração da tensão superficial nos problemas tanto para um como para vários fluidos.

Para a partícula i de fase k , um gradiente de índices de cores não desaparece se existirem partículas vizinhas da fase l , $l \neq k$, segundo a Eq. 13.

$$\nabla C_i^{kl} = \sigma_i \sum_{j=1}^N \left[\frac{C_i^l}{\sigma_i^2} + \frac{C_j^l}{\sigma_j^2} \right] \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \boldsymbol{\eta}_{ij}, \quad l \neq k \quad (13)$$

Em que $C_i^l \equiv 0$. Por conseguinte a interface da fase entre $k - l$ obtêm o esforço por tensão superficial como a Eq. 14.

$$\Pi_{kl}^{(TS)} = \alpha^{kl} \frac{1}{|\nabla C^{kl}|} \left(\frac{1}{d} \mathbf{I} |\nabla C^{kl}|^2 - \nabla C^{kl} \nabla C^{kl} \right), \quad l \neq k \quad (14)$$

Onde α^{kl} é o coeficiente de tensão superficial entre as fases k e l . Como resultado, o esforço total na superfície da partícula i é igual a Eq. 15.

$$\Pi_i^{(TS)} = \sum_{l=1}^N \Pi_{ij}^{(TS)}, \quad l \neq k \quad (15)$$

Assim, semelhante à formulação do termo de pressão, a aceleração devido a tensão superficial é escrita como a Eq. 16.

$$\left\langle \frac{d\mathbf{v}^P}{dt} \right\rangle = \mathbf{F}^{(TS)} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N \left(\Pi_i^{(TS)} \mathbf{v}_i^2 + \Pi_j^{(TS)} \mathbf{v}_j^2 \right) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \boldsymbol{\eta}_{ij}, \quad (16)$$

Observe que a Eq. 16 é conservativa para os casos de momento angular e linear (Hu and Adams, 2006).

Na Fig. 1 apresenta-se dois exemplos implementados empregando a formulação de tensão superficial para uma e duas fases, onde observa-se como uma gota quadrada se deforma no passo do tempo em uma forma elíptica pelo efeito da capilaridade entre fluidos imiscíveis.

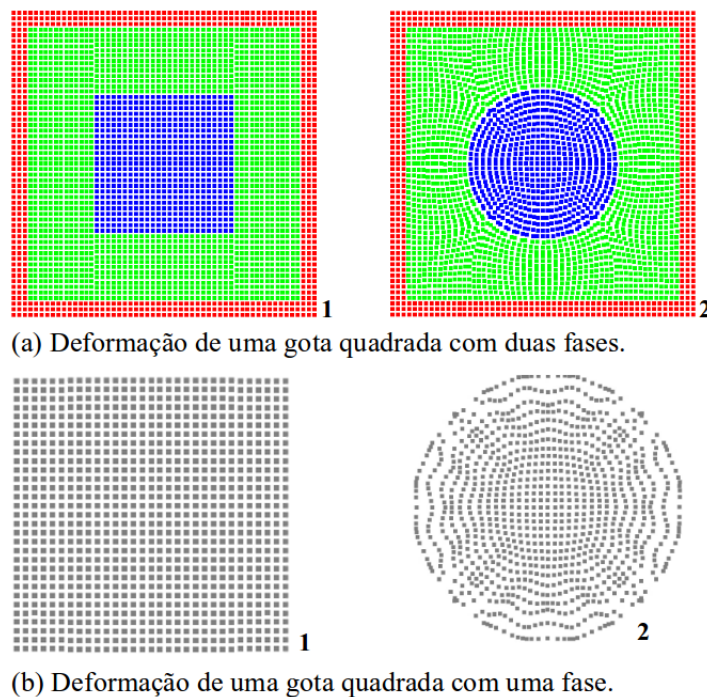


Figura 1: Implementação de tensão superficial para os casos de deformação de uma gota quadrada, para uma e duas fases.

2.4 Smoothed dissipative particle dynamics (SDPD)

Recentemente, o método SPH foi estendido para o método SDPD para problemas mesoscópicos (Espanol and Revenga, 2003). Ao contrário do método DPD (Liu et al., 2007), o método SDPD permite escolher uma equação de estado e especificar coeficientes de transporte diretamente. Além disso, flutuações térmicas também podem ser incluídas de um modo consistente fisicamente, através do aumento natural das magnitudes de flutuação, enquanto a escala física do problema diminui à escala mesoscópica (Hu and Adams, 2006).

Portanto, dentro da formulação com SDPD (Espanol and Revenga, 2003) a Eq. 7 e a Eq.

8, representam a parte dinâmica determinística das partículas. Assim, usando o formalismo GENERIC (Ottinger and Grmela, 1997; Grmela and Öttinger, 1997), podem ser levadas em conta as flutuações térmicas ao postular as seguintes expressões para a massa e a flutuação no momento com a Eq. 17 e a Eq. 18 respectivamente.

$$d\tilde{m}_i = 0, \quad (17)$$

$$d\tilde{\mathbf{P}}_i = \sum_{j=1}^N B_{ij} d\bar{W}_{ij} \boldsymbol{\eta}_{ij}, \quad (18)$$

Onde $d\bar{W}_{ij}$ é a parte deviatórica da parte simétrica de uma matriz de incrementos independentes obtido por um processo de Wiener $W_{ij} = W_{ji}$ (Espanol, 2002; Vázquez-Quesada et al., 2009), ou seja, $d\bar{W}_{ij} = (dW_{ij} + dW_{ij}^T) / 2 - \text{tr}[dW_{ij}] \mathbf{I} / d$. E definindo B_{ij} como a Eq. 19.

$$B_{ij} = \left[\frac{-8k_B T \eta_j \eta_i}{\eta_j + \eta_i} \left(\frac{1}{\sigma_i^2} + \frac{1}{\sigma_j^2} \right) \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \right]^{1/2}, \quad (19)$$

O k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do fluido (Hu and Adams, 2006). Note que a evolução das equações podem ser escritas para SPH e SDPD na formulação GENERIC como a Eq. 20 e a Eq. 21.

$$d\mathbf{v}_i = \left\langle \frac{d\mathbf{v}^{(P)}}{dt} \right\rangle dt + \mathbf{F}^{(\nu)} dt + \mathbf{F}^{(TS)} dt + \frac{1}{m_i} d\tilde{\mathbf{P}}_i, \quad (20)$$

$$d\mathbf{r}_i = \mathbf{v}_i dt, \quad (21)$$

Onde $\left\langle \frac{d\mathbf{v}^{(P)}}{dt} \right\rangle$ e $\mathbf{F}^{(TS)}$ são obtidas como as já mencionadas Eq. 7 e Eq. 16 respectivamente, representando a parte conservativa do fluido. No entanto, $\mathbf{F}^{(\nu)}$ é descrita pela Eq. 8, sendo a parte dissipativa na equação de conservação de momento.

3 Validação

Implementam-se os casos para validação de fluxo de Poiseuille e Couette, colisão de uma gota em uma película de líquido e três exemplos de implementação para os casos mesoscópicos para fluidos bi-fásicos.

3.1 Fluxo de Poiseuille e Fluxo de Couette

Emprega-se os exemplos de fluxo de Poiseuille e fluxo de Couette (Morris et al., 1997; Sigalotti et al., 2003; Ellero and Tanner, 2005), os quais são exemplos clássicos usados para este tipo de fronteiras em CFD (Adami et al., 2012; Litvinov et al., 2010). Para os exemplos apresentados as propriedades do fluido usado são $\mu = 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ e $c = 2,5 \times 10^{-4} \text{ m/s}$ e com uma dimensão no canal com fronteira periódica de $1 \times 2 \text{ mm}$.

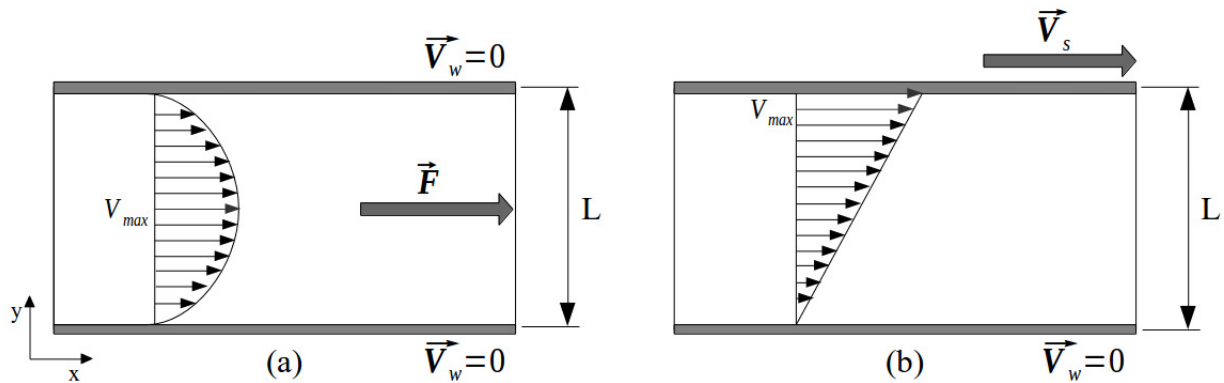


Figura 2: Condições iniciais dos problemas: (a) fluxo de Poiseuille com uma força externa (F) contante no tempo de $2,0 \times 10^{-4} \text{ m/s}^2$; (b) fluxo de Couette, com uma velocidade externa constante (V_s) no tempo na parede superior de $2,5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$.

3.1.1 Fluxo de Poiseuille

O fluxo de Poiseuille foi projetado como um fluido que escoar devido à condição de força externa constante no tempo com $F = 2,0 \times 10^{-4} \text{ m/s}^2$ como apresenta-se na Figura 2 (a). Assim, o problema está configurado com uma fronteira periódica lateral e duas paredes rígidas superior e inferior.

A Fig. 3 apresenta a evolução no tempo do problema de Fluxo de Poiseuille, demonstrando a evolução da deformação na distribuição das partículas com destaque para as partículas rosas. No restante das partículas além da distribuição apresenta-se o campo de velocidades. A distribuição final das partículas rosas em forma parabólica e o campo de velocidade foi um resultado semelhante ao esperado neste tipo de exemplo (Morris et al., 1997; Sigalotti et al., 2003).

Além disso, a Fig. 4 mostra o perfil de velocidades das partículas para o Fluxo de Poiseuille no transcurso do tempo e em relação com a posição vertical. Especialmente, este exemplo mostra a capacidade de atingir o estado estável quase permanente para o simulador. Portanto, o resultado obtido com o simulador foi bem sucedido no que tange a modelagem do Fluxo de Poiseuille (Morris et al., 1997; Sigalotti et al., 2003; Violeau, 2012).

3.1.2 Fluxo de Couette

O fluxo de Couette foi implementado com a característica de uma condição constante de velocidade externa de $2,5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ na parede superior da fronteira com parede rígida como apresentado na Fig. 2 (b). Portanto, o exemplo está configurado por uma fronteira periódica lateral e duas paredes rígidas superior e inferior.

Na Fig. 5 observa-se a evolução no tempo no problema de fluxo de Couette. É observada a deformação ao longo do tempo na distribuição das partículas, com destaque das duas colunas de partículas rosas. Além disso, no restante das partículas visualiza-se o campo de velocidades. Na distribuição das partículas rosas observa-se uma inclinação, que é o resultado aguardado, e o campo de velocidades também produz um resultado ótimo neste tipo de aplicação (Morris et al., 1997; Sigalotti et al., 2003; Litvinov et al., 2010).

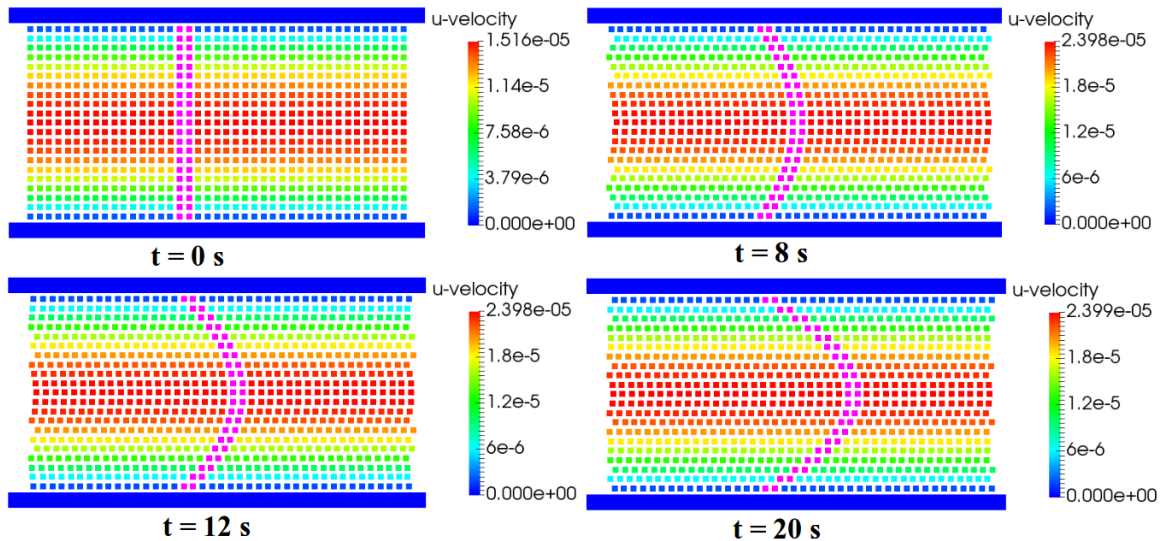


Figura 3: Exemplo de fluxo de Poiseuille no passo do tempo, mostrando-se duas colunas de partículas rosas e ao mesmo momento observa-se sobre o resto das partículas o campo de velocidades.

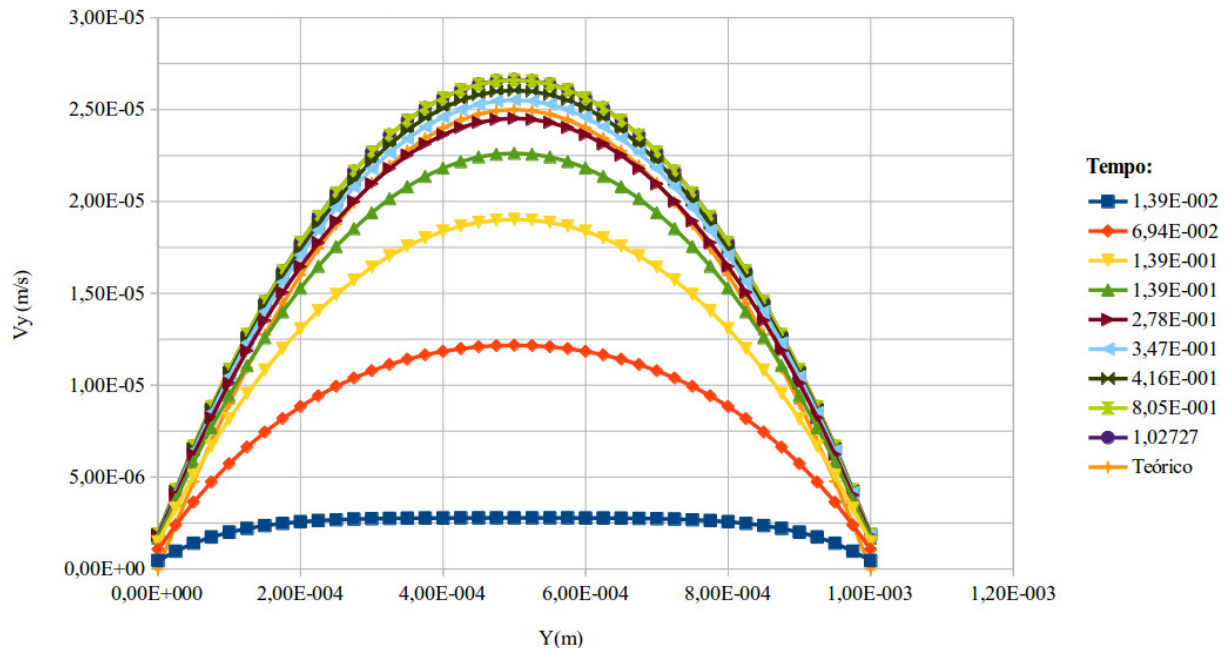


Figura 4: Mostra-se o exemplo de fluxo de Poiseuille para a relação entre velocidade no eixo horizontal (V_x) e a posição vertical (y) no passo do tempo.

A Fig. 6 expõe o perfil de velocidades das partículas para o fluxo de Couette no transcurso do tempo em relação com a posição vertical. Especialmente este exemplo mostra a capacidade de atingir o estado estável quase permanente para o simulador depois do passo do tempo (Adami et al., 2012).

Portanto, os resultados foram semelhantes ao esperado para esse tipo de problema em comparação com a literatura (Litvinov et al., 2010; Sigalotti et al., 2003; Ellero and Tanner, 2005). Desse modo, os resultados satisfatórios para as simulações de fluxo de Poiseuille e fluxo de Couette

validam também a formulação baseada nos trabalhos de S. Adami e X.Y Hu apresentados, e a implementação mesoscópica de SDPD para o comportamento mesoscópico.

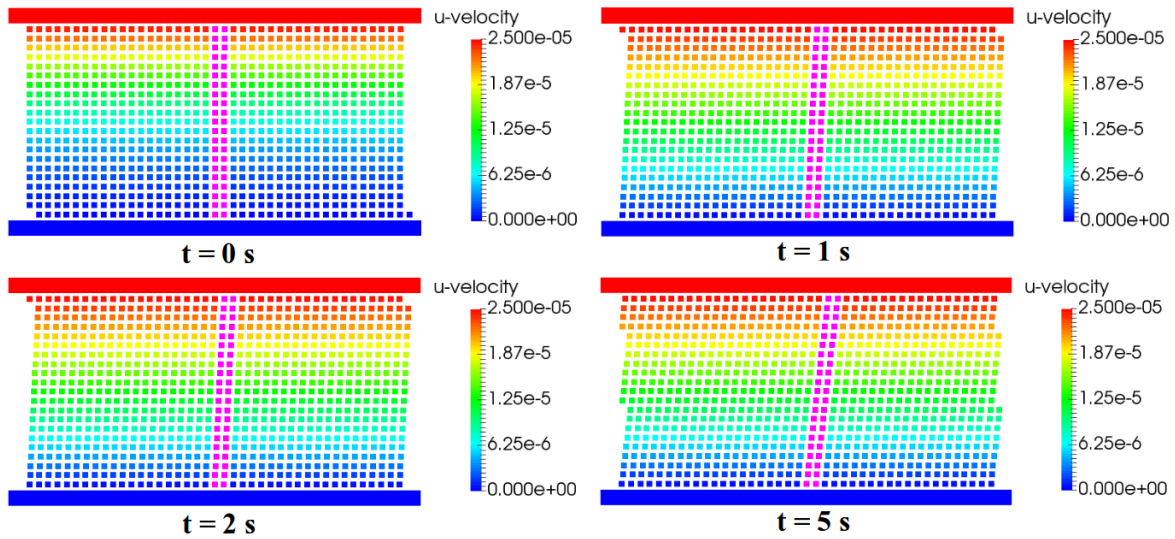


Figura 5: Exemplo de fluxo de Couette no passo do tempo, mostrando-se duas colunas de partículas rosas e ao mesmo momento observa-se sobre o resto das partículas o campo de velocidades.

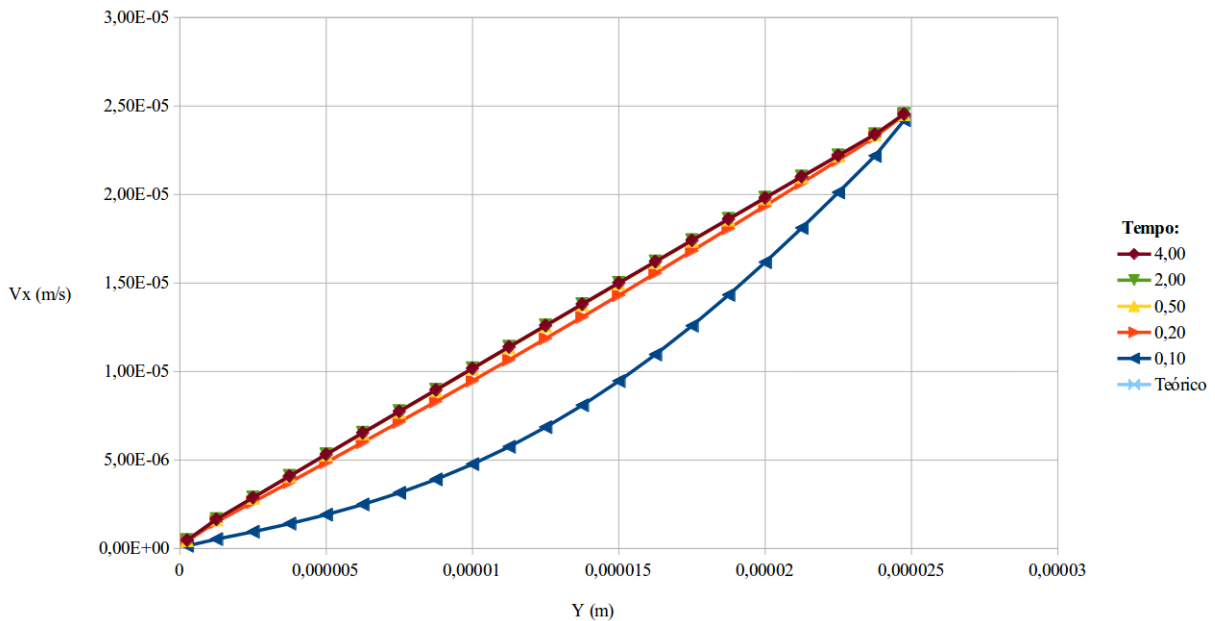


Figura 6: Mostra-se o exemplo de fluxo de Couette para a relação entre velocidade no eixo horizontal (V_x) e a posição vertical (y) no passo do tempo.

3.2 Colisão de uma gota com uma película de líquido

Realizou-se o exemplo de uma gota colidindo em uma película de líquido, esta simulação procura validar a interação de dois fluidos de condições iniciais diferentes para superfície livre. As propriedades dos fluidos são $\mu = 1 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ e $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, e a disposição inicial da

geometria da discretização das partículas foi definida segundo a Fig. 7.

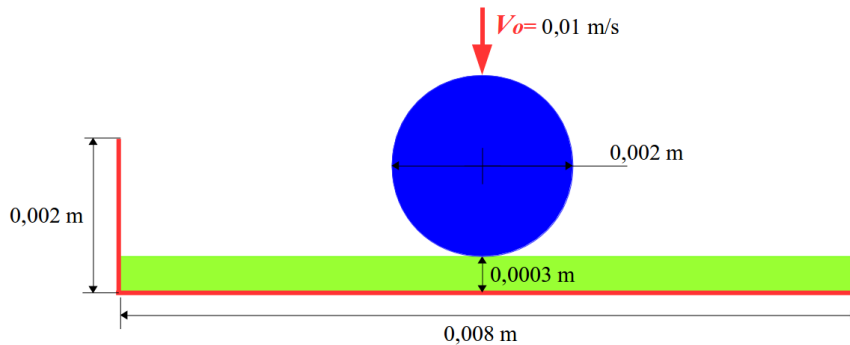


Figura 7: Disposição inicial da geometria da discretização das partículas e as fronteiras de parede rígida para o exemplo de uma gota colidindo com uma película de líquido.

O exemplo pode ser observado na Fig. 8, onde o fluido, com velocidade do som de 0,4 m/s, evolui no tempo. A gota colide com uma velocidade vertical de 0,01 m/s com a película de fluido contida em uma fronteira de parede sólida (Fig. 8). Portanto, apresenta-se a evolução no tempo na interação entre os dois fluidos e como comporta-se o campo de velocidades das partículas. Assim, apresenta-se resultados físicos para este tipo de problema no campo de velocidade e na distribuição das partículas (Xu et al., 2014; Jiang et al., 2013; Nair and Tomar, 2014).

3.3 Fluxo mesoscópico de Poiseuille e Couette para duas fases

Implementou-se um micro-canal para duas fases de um fluido com características semelhantes a água e óleo (relação de densidade próximo de um), com as condições do fluxo de Poiseuille e o fluxo de Couette para duas configurações com domínio quadrado do óleo (na Fig. 9 (a)) e domínio circular do óleo (na Fig. 9 (b)). Com uma configuração de função de suavização do kernel de Quintic, α igual a $1 \cdot 10^{-9}$ Pa e altura (L) igual 1 mm.

Portanto, nas Fig. 10 e Fig. 11 apresenta-se a evolução no tempo do fluxo mesoscópico para os casos de Poiseuille e Couette. Observa-se também a deformação das fases escoando entre si. Desse modo, para os dois casos da Fig. 10, com óleo com domínio quadrado não se atinge um estado estável mas se consegue o escoamento aguardado para um fluido entre duas paredes com condição de no-slip na interação fluido-estrutura. No entanto, para o domínio circular na Fig. 11 para os dois problemas propostos, atinge-se um estado de estabilidade, onde o fluido alcança uma forma estável, particularmente no caso de Couette (Fig. 11 (b)).

Dessa forma, o uso da tensão superficial com o modelo CSF, SDPD e SPH, apresenta resultados promissores na aplicação em micro-canais e micro-fluido, além de obter soluções satisfatórias em termos quantitativos em comparação com outras implementações de aproximação semelhante (Hu and Adams, 2006; Adami et al., 2010).

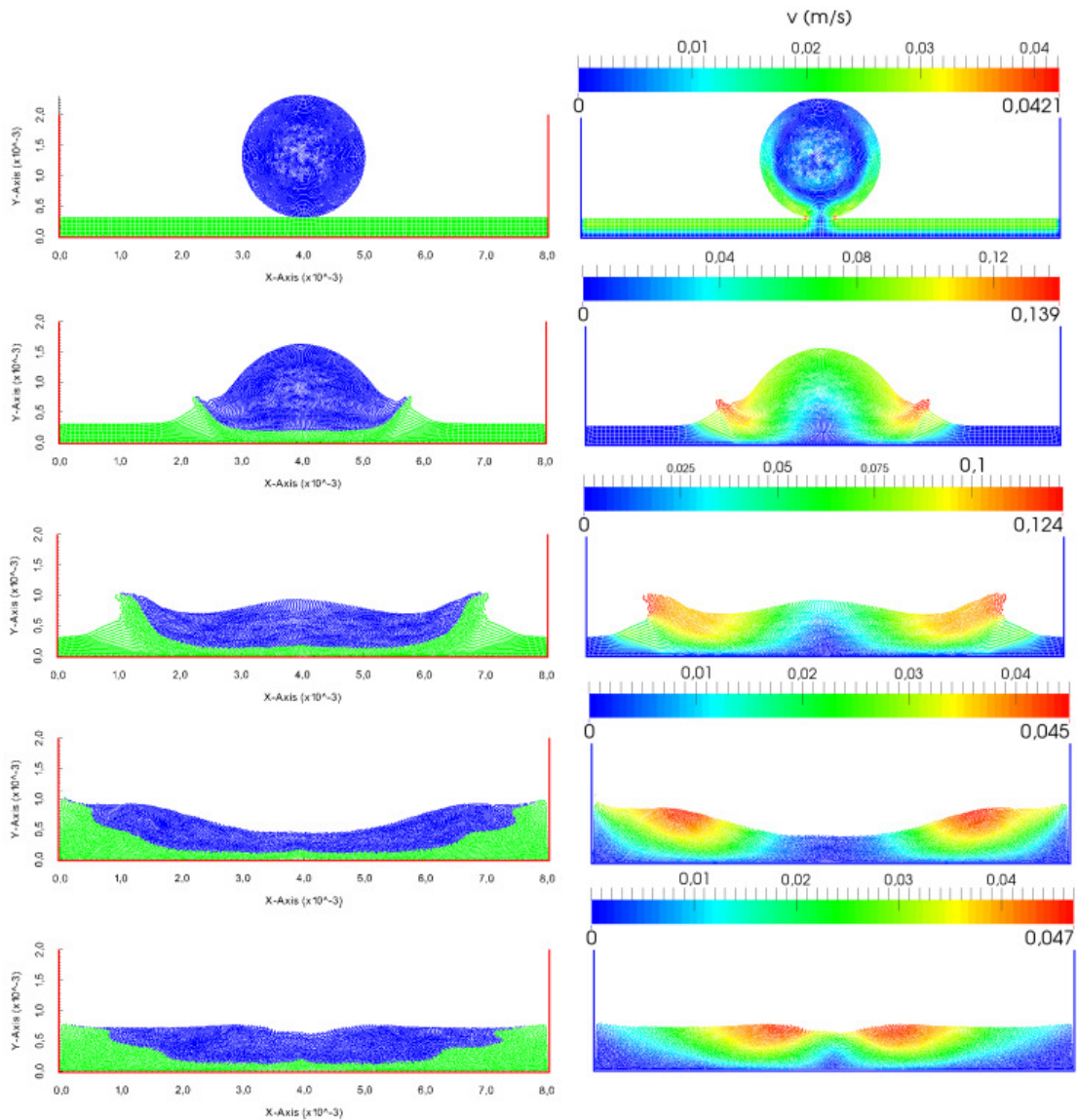


Figura 8: Evolução no tempo de uma gota colidindo com uma película de líquido com uma velocidade vertical inicial de 0,01 m/s. Mostra-se o campo de velocidades e como deformam-se os fluidos para uma velocidade de som (c) de 0,4 m/s.

3.4 Microcanal com garganta e com obstáculo circular

Nessa seção apresenta-se aplicações que se encontram em desenvolvimento, implementadas nos casos de Microcanal com garganta em duas fases (Fig. 12) e Microcanal com obstáculo circular (Fig. 13): problemas que são encontrados em diversas aplicações em micro-dispositivos.

Na Fig. 12, apresenta-se o escoamento da gota de óleo na água (Fig. 12 (a)) e o perfil das grandezas das velocidades (Fig. 12 (b)) com resultados promissórios na distribuição das partículas e no campo de velocidades.

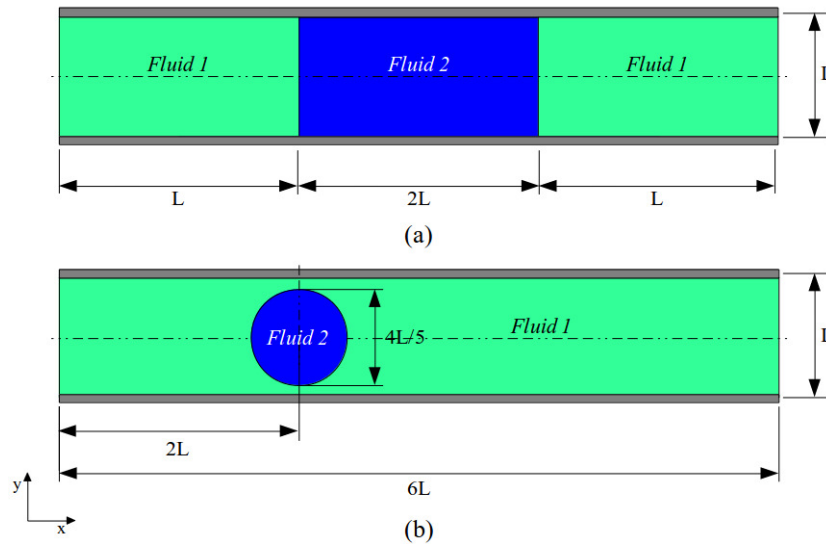


Figura 9: Condições iniciais do exemplo de fluxo mesoscópico com $L = 1$ mm. (a) Domínio quadrado do óleo no micro-canal; (b) Domínio circular do óleo no micro-canal.

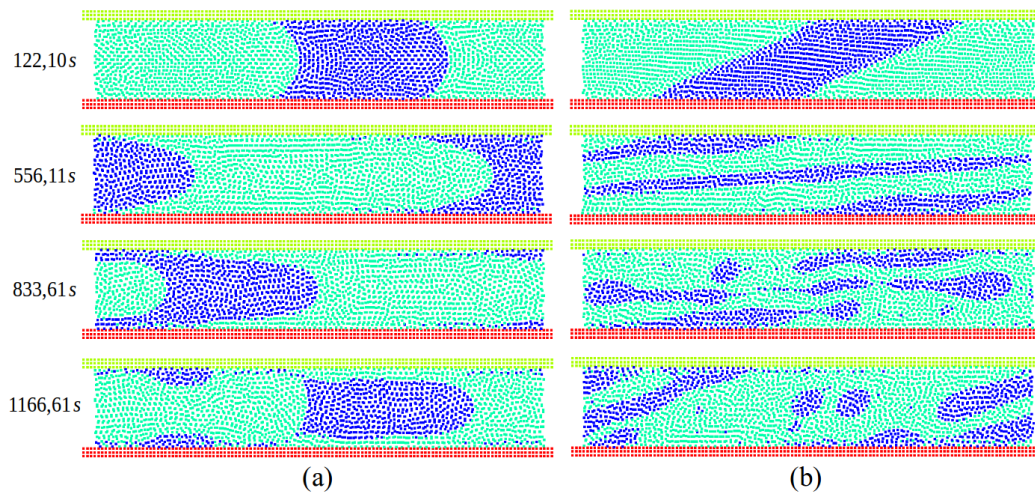


Figura 10: Evolução no tempo do fluxo mesoscópico de duas fases com domínio quadrado do óleo no micro-canal para as condições de: (a) fluxo de Poiseuille; (b) fluxo de Couette.

A Fig. 13 apresenta o escoamento do fluido e a interação com um obstáculo circular como observa-se na Fig. 13. Apresenta-se também o perfil de velocidades obtidas. Assim, tanto o perfil de velocidades como a distribuição de partículas apresentam resultados coerentes para este tipo de problema. Portanto, para os casos apresentados de micro-canais, o simulador com SPH mostra boas perspectivas para a implementação em sistemas mais complexos de micro-dispositivos.

4 Conclusões preliminares

- Validou-se o simulador para as implementações de problemas clássicos como, colisão de uma gota com uma película de líquido, o fluxo de Couette e o fluxo de Poiseuille para os casos macroscópicos e mesoscópicos, obtendo-se resultados adequados.

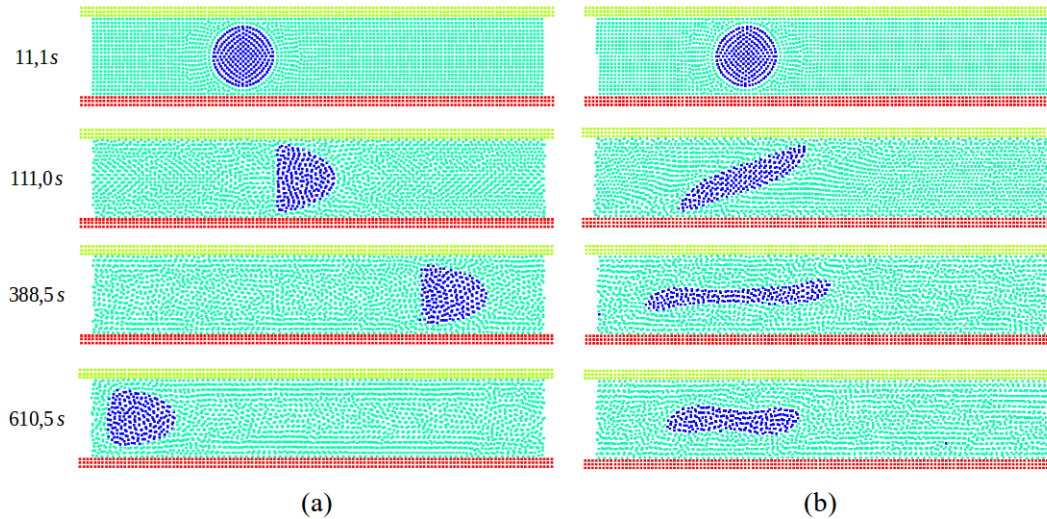


Figura 11: Evolução no tempo do fluxo mesoscópico de duas fases com domínio circular do óleo no microcanal para as condições de: (a) Fluxo de Poiseuille; (b) Fluxo de Couette.

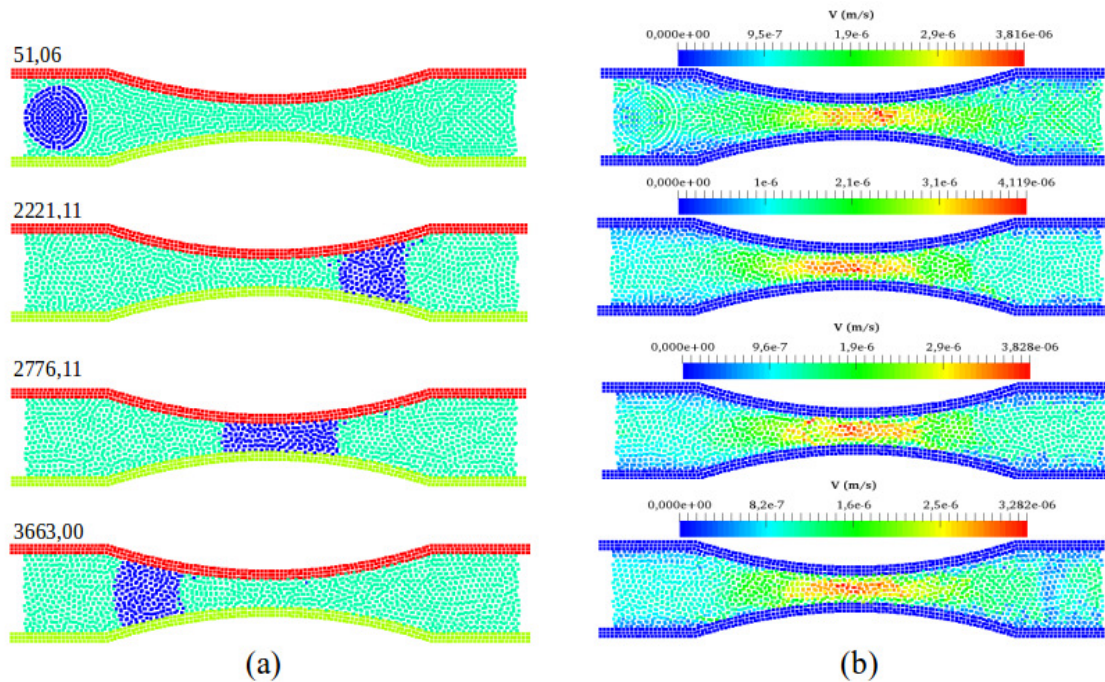


Figura 12: Avanço da gota de óleo na água no microcanal com garganta: (a) Distribuição de partículas; (b) Perfil da grandeza das velocidades das partículas.

- Apresentou-se a aproximação proposta pelos trabalhos de Adami e Hu para SPH. Dessa maneira, as aproximações básicas para derivadas espaciais média de partículas foram derivadas a partir de uma função de suavização em que as partículas vizinhas só contribuem para o volume específico, mas não para a densidade na interação entre diferentes fluidos em diferentes fases.

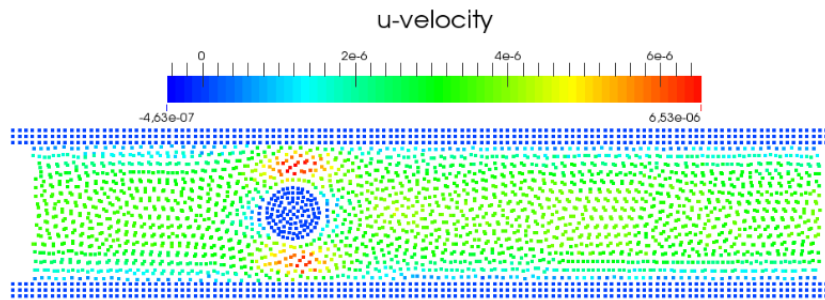


Figura 13: Perfil da grandeza das velocidades das partículas para o caso de Microcanal com obstáculo circular.

- Implementou-se uma aproximação que integra o comportamento do estado mesoscópico, usando o método SDPD com a metodologia GENERIC para adicionar a flutuação térmica e incluir a tensão superficial empregando CSF. Os resultados foram validados para problemas de escoamento mesoscópico em micro-canais.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao financiamento da FAPESP (Processo 2012/21090-5).

Referências

- Adami, S., Hu, X., and Adams, N. (2010). A new surface-tension formulation for multi-phase SPH using a reproducing divergence approximation. *J. Comput. Phys.*, 229(13):5011–5021.
- Adami, S., Hu, X., and Adams, N. (2012). A generalized wall boundary condition for smoothed particle hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 231(21):7057–7075.
- Anderson, J. a., Lorenz, C. D., and Travesset, A. (2008). General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units. *J. Comput. Phys.*, 227(10):5342–5359.
- Cheng, J., Kricka, L., Sheldon, E., and Wilding, P. (1998). Sample preparation in microstructured devices. *Microsyst. Technol. Chem. Life Sci.*, 194.
- Crespo, A. C., Dominguez, J. M., Barreiro, A., Gómez-Gesteira, M., and Rogers, B. D. (2011). GPUs, a new tool of acceleration in CFD: efficiency and reliability on smoothed particle hydrodynamics methods. *PLoS One*, 6(6):e20685.
- Ellero, M. and Tanner, R. (2005). SPH simulations of transient viscoelastic flows at low Reynolds number. *J. Nonnewton. Fluid Mech.*, 132(1-3):61–72.
- Espanol, P. (2002). Dissipative particle dynamics revisited. *SIMU 'Challenges Mol. simulations' Newsl.*, (4).
- Espanol, P. and Revenga, M. (2003). Smoothed dissipative particle dynamics. *Phys. Rev. E*, 67(2):1–12.
- Espanol, P., Serrano, M., and Zuñiga, I. (1997). Coarse-graining of a fluid and its relation with dissipative particle dynamics and smoothed particle dynamic. *Int. J. Mod. ...*, 8(4):899–908.

- Filipovic, N., Ivanovic, M., and Kojic, M. (2008). A comparative numerical study between dissipative particle dynamics and smoothed particle hydrodynamics when applied to simple unsteady flows in microfluidics. *Microfluid. Nanofluidics*, 7(2):227–235.
- Flekkoy, E., Coveney, P. V. P., De Fabritiis G, Flekko, E. G., and Fabritiis, G. D. (2000). Foundations of dissipative particle dynamics. *Phys. Rev. E. Stat. Phys. Plasmas. Fluids. Relat. Interdiscip. Topics*, 62(2 Pt A):2140–57.
- Gingold, R. and Monaghan, J. (1982). Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 46(3):429–453.
- Gomez-Gesteira, M., Rogers, B. D., Dalrymple, R. a., and Crespo, A. J. (2010). State-of-the-art of classical SPH for free-surface flows. *J. Hydraul. Res.*, 48(sup1):6–27.
- Gray, J. and Monaghan, J. (2003). Caldera collapse and the generation of waves. *Geochemistry Geophys. Geosystems*.
- Grmela, M. and Öttinger, H. H. (1997). Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism. *Phys. Rev. E*, 56(6):6620–6632.
- Hoogerbrugge, P., Koelman, J., Search, H., Journals, C., Contact, A., Iopscience, M., and Address, I. P. (2007). Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *EPL (Europhysics Lett.)*, 155.
- Hu, X. X. Y. and Adams, N. a. (2006). A multi-phase SPH method for macroscopic and mesoscopic flows. *J. Comput. Phys.*, 213(2):844–861.
- Jiang, T., Ouyang, J., Li, X., Ren, J., and Wang, X. (2013). Numerical study of a single drop impact onto a liquid film up to the consequent formation of a crown. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 54(5):720–728.
- Li, J., Ge, W., Wang, W., Yang, N., Liu, X., Wang, L., He, X., Wang, X., Wang, J., and Kwauk, M. (2013). *From Multiscale Modeling to Meso-Science*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- Litvinov, S., Ellero, M., Hu, X., and Adams, N. (2010). A splitting scheme for highly dissipative smoothed particle dynamics. *J. Comput. Phys.*, 229(15):5457–5464.
- Liu, M., Meakin, P., and Huang, H. (2007). Dissipative particle dynamics simulation of multiphase fluid flow in microchannels and microchannel networks. *Phys. Fluids*, 19(3):033302.
- Liu, M. B. and Liu, G. R. (2004). Meshfree particle simulation of micro channel flows with surface tension. *Comput. Mech.*, 35(5):332–341.
- Lucy, L. B. (1977). A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.*, 82:1013.
- Monaghan, J. (1992). Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 30(1):543–574.
- Monaghan, J. (2012). Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 44(1):323–346.

- Morris, J. P. (2000). Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 33(3):333–353.
- Morris, J. P., Fox, P. J., and Zhu, Y. (1997). Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. *J. Comput. Phys.*, 136(1):214–226.
- Nair, P. and Tomar, G. (2014). An improved free surface modeling for incompressible SPH. *Comput. Fluids*, 102:304–314.
- Nisar, A., Afzulpurkar, N., Mahaisavariya, B., and Tuantranont, A. (2008). MEMS-based micropumps in drug delivery and biomedical applications. *Sensors Actuators B Chem.*, 130(2):917–942.
- Nugent, S. and Posch, H. (2000). Liquid drops and surface tension with smoothed particle applied mechanics. *Phys. Rev. E. Stat. Phys. Plasmas. Fluids. Relat. Interdiscip. Topics*, 62(4 Pt A):4968–75.
- Ottinger, H. and Grmela, M. (1997). Dynamics and thermodynamics of complex fluids. II. Illustrations of a general formalism. *Phys. Rev. E*, 56(6):6620–6632.
- Quesada, A. V. (2010). *Micro-reología computacional*. PhD thesis, National Distance Education University.
- Sigalotti, L. D. G., Klapp, J., Sira, E., Meleán, Y., and Hasmy, A. (2003). SPH simulations of time-dependent Poiseuille flow at low Reynolds numbers. *J. Comput. Phys.*, 191(2):622–638.
- Sigalotti, L. D. G. and López, H. (2008). Adaptive kernel estimation and SPH tensile instability. *Comput. Math. with Appl.*, 55(1):23–50.
- Sukop, M. and Thorne, D. (2006). *Lattice Boltzmann Modeling*, volume 79. Springer.
- Tong, M. and Browne, D. J. (2014). An incompressible multi-phase smoothed particle hydrodynamics (SPH) method for modelling thermocapillary flow. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 73:284–292.
- Tripp, G. I. and Vearncombe, J. R. (2004). Fault/fracture density and mineralization: A contouring method for targeting in gold exploration. *J. Struct. Geol.*, 26(6-7):1087–1108.
- Vázquez-Quesada, A., Ellero, M., and Español, P. (2009). Consistent scaling of thermal fluctuations in smoothed dissipative particle dynamics. *J. Chem. Phys.*, 130(3):034901.
- Vázquez-Quesada, A., Ellero, M., and Español, P. (2012). A SPH-based particle model for computational microrheology. *Microfluid. Nanofluidics*, 13(2):249–260.
- Violeau, D. (2012). *Fluid Mechanics and the SPH method: theory and applications*, volume 1686. OXFORD UNIVERSITY PRESS, Oxford.
- Xu, X., Ouyang, J., Jiang, T., and Li, Q. (2014). Numerical analysis of the impact of two droplets with a liquid film using an incompressible SPH method. *J. Eng. Math.*, 85(1):35–53.