



MÉTODO DE SIMULAÇÃO MESOSCÓPICA EM DINÂMICA MOLECULAR PARA FLUÍDOS CARREGADOS

AUTOR: IGOR MORAIS TELLES; ORIENTADOR: ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Instituto de Física - Av. Bento Gonçalves, 9500 – Porto Alegre, RS, Brasil

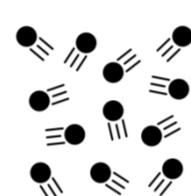
INTRODUÇÃO

Simulações computacionais são de grande importância para o tratamento de problemas físicos complexos. O problema abordado neste projeto é o estudo do comportamento hidrodinâmico de um fluido carregado. Para este desenvolvimento, é implementada uma simulação de Dinâmica Molecular usando a técnica Dissipative Particle Dynamics (DPD).

OBJETIVOS

O projeto apresenta como objetivo o desenvolvimento e a validação de um método em dinâmica molecular para simular o comportamento de fluidos carregados, com foco no estudo do fenômeno chamado eletroosmose. Para a validação do método, verificam-se se os resultados obtidos são compatíveis com as previsões da equação de Stokes.

METODOLOGIA



Interação entre partículas via forças DPD e potenciais coulombianos



Verificação das condições de contorno



Integração das equações de movimento via Velocity-Verlet



Obtenção de dados e resultados

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Um fluido pode ser simulado como um conjunto de partículas. Quando acrescido de íons, temos um fluido carregado.

O método desenvolvido para a simulação do problema se baseia na técnica de dinâmica estocástica DPD, onde a interação entre uma partícula i e uma partícula j do fluido carregado é governada por:

$$\text{FORÇA CONSERVATIVA: } \mathbf{F}^C = \alpha_{ij} (1 - r_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (r_{ij} < 1)$$

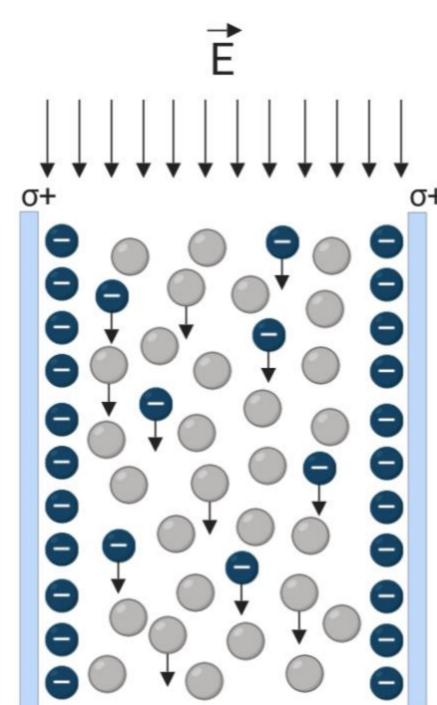
$$\text{FORÇA DISSIPATIVA: } \mathbf{F}^D = -\gamma w^D(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (r_{ij} < 1)$$

$$\text{FORÇA RANDÔMICA: } \mathbf{F}^R = \sigma w^R(r_{ij}) \zeta \Delta t^{-1/2} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (r_{ij} < 1)$$

Onde r_{ij} é a distância entre as partículas i e j , α_{ij} parâmetro de conservação, γ e σ parâmetros de ruído e ζ é um número aleatório de uma distribuição uniforme¹.

As interações entre íons são dadas por potenciais coulombianos.

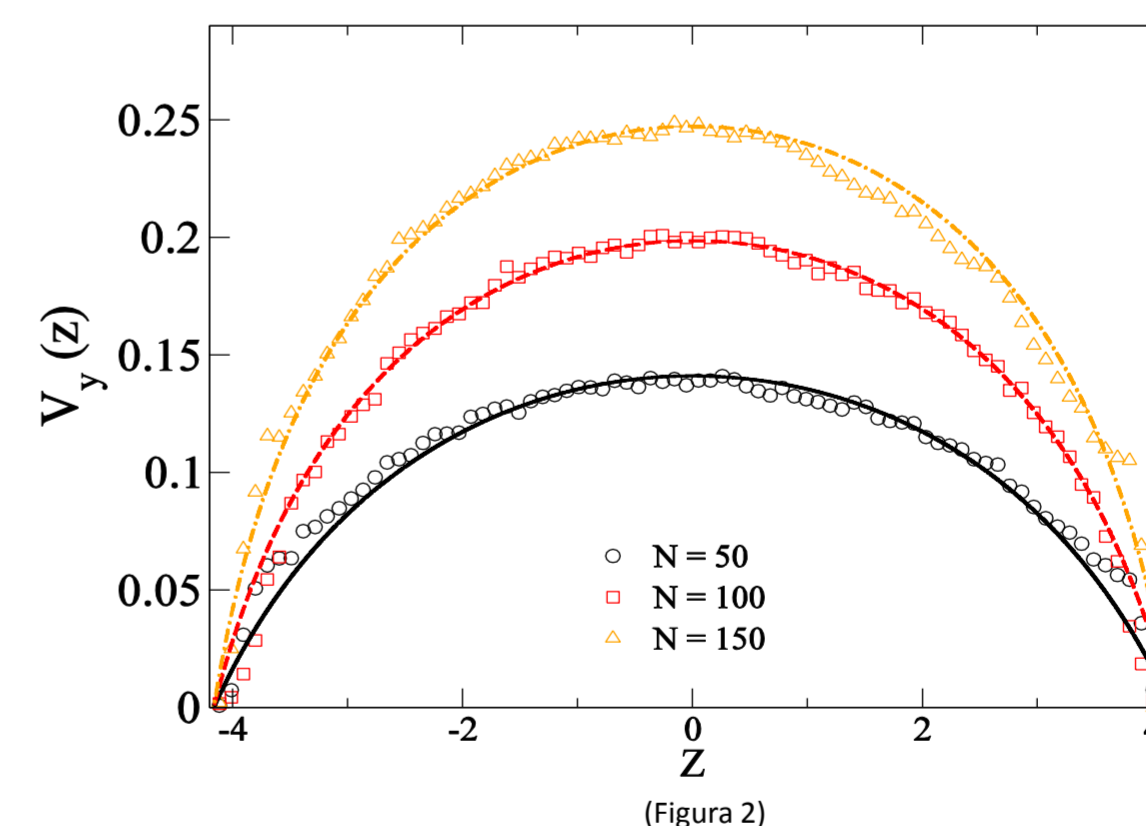
O fluido é confinado em uma direção por paredes que apresentam condições de contorno de não deslizamento, enquanto nas demais direções há condições periódicas de contorno. É aplicado um campo elétrico ao sistema para que os íons entrem em um movimento de flow. Na interação entre íons e solvente, é induzido o flow ao solvente². Este fenômeno é chamado de eletroosmose, representado abaixo pela figura 1.



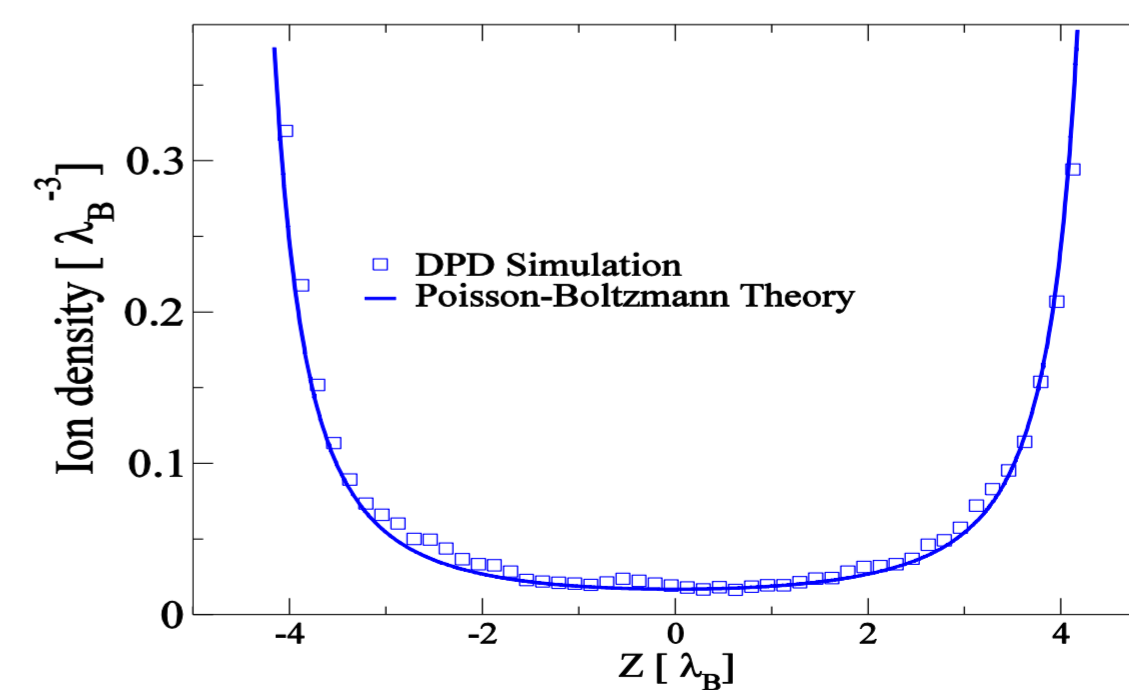
(Figura 1)

RESULTADOS

A partir dos dados obtidos, foram geradas as duas figuras abaixo. A figura 2 apresenta o perfil de velocidade para três quantidades diferentes de íons, onde as linhas são as previsões teóricas da equação de Stokes. A figura 3 apresenta o perfil de densidade de 100 íons adicionados ao solvente. As unidades são dadas pelo comprimento de Bjerrum (λ_B).



(Figura 2)



(Figura 3)

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O método desenvolvido é adequado para tratar fluidos carregados e os resultados obtidos são compatíveis com a teoria utilizada. No futuro, pretende-se verificar o comportamento de fluido que seja composto por solvente, íons e polímeros, e assim, comparar perfis de velocidade.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. R. D. Groot and P. B. Warren - Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation.
2. Smiatek et al – Mesoscopic simulations of the counterion-induced electro-osmotic flow: A comparative study.