

Propriedades dinâmicas de fluido por simulação computacional: métodos híbridos atômico-contínuo.

Luciano T. Costa (PQ)*⁽¹⁾, Mauro. C. C. Ribeiro (PQ)⁽²⁾

1 -Universidade Federal de Alfenas - Rua Gabriel Monteiro da Silva 700, Centro, Alfenas-MG.

2 -Instituto de Química – Universidade de São Paulo, BOX 26077 CEP 05513-970

* costalt@gmail.com

Palavras Chave: *dinâmica molecular, simulação de fluido computacional, métodos híbridos*

Introdução

Métodos computacionais para o estudo de propriedades dinâmicas de fluidos podem considerar o sistema como um contínuo ou como uma coleção de moléculas. Simulação por dinâmica molecular (MD) inclui resolução molecular, enquanto que dinâmica de fluidos computacional (CFD) considera o fluido como um contínuo. Este trabalho oferece uma revisão dos métodos híbridos MD/CFD recentemente propostos na literatura. Os fundamentos teóricos, aspectos básicos dos métodos computacionais e as propriedades dinâmicas tipicamente calculadas por MD e CFD são apresentados separadamente para que o leitor aprecie as semelhanças e diferenças entre essas metodologias.

Resultados e Discussão

(A) Dinâmica de Fluidos Computacional

Dinâmica de Fluidos Computacional, CFD,¹ utiliza métodos numéricos para simulação de fenômenos que envolvem o fluxo de fluidos com ou sem troca de calor. A solução numérica das equações de Navier-Stokes permite obter distribuições de velocidade, pressão e temperatura na região de escoamento. A solução é possível com equações baseadas na equação de estado do sistema, $P = P(\rho, T)$, sendo P a pressão. Simplificações podem ser postuladas dependendo do tamanho e geometria do sistema e condições de contorno podem ser introduzidas para a solução numérica das equações

(B) Dinâmica Molecular Clássica

Simulação MD clássica² é baseada na evolução temporal de coordenadas e momento das N partículas do sistema, $[\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N]$, onde $\mathbf{r}^N = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ e $\mathbf{p}^N = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots, \mathbf{p}_N)$. Simulação MD consiste na solução numérica das equações clássicas de movimento onde a força resultante na partícula i é

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}, \text{ sendo } V(r) \text{ é a função energia}$$

potencial. A partir de um microestado inicial, $[\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)]$, a integração das equações de movimento permite obter microestados em instantes sucessivos dada a função $V(r)$ assumida para o sistema. A

função energia potencial é o cerne do método de simulação MD, incluindo termos intermoleculares e contribuições intramoleculares.

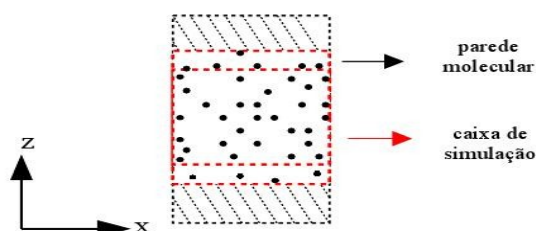


Figura 1. Modelo usado nas simulações híbridas

Consideramos a camada superior e inferior ao longo do eixo z da caixa de simulação NEMD como regiões de sobreposição entre a descrição atômica e contínua. O sistema inteiro é composto de uma parte discreta na região $-11 < z < 11$ Å, entre duas partes contínuas que estendem o tamanho total do sistema até $z = \pm 30$ Å, com regiões de sobreposição definidas por paredes de espessura 4 Å (ver Fig 1). Condições de contorno periódicas existem apenas ao longo das direções x e y . O campo de velocidade médio nos extremos em z da região atômica atua como a condição de contorno para a parte CFD, assim como as velocidades das partículas são corrigidas para serem consistentes com o campo de velocidade CFD.

Conclusões

Resultados³ evidenciam a eficácia do modelo híbrido em estudar fluidos Newtonianos. Simulações para água pura e soluções aquosas de sais revelam bons resultados e acordo com técnicas convencionais, além de poder inferir sobre a reologia.

Agradecimentos

Agradecemos a Fapesp pelo apoio e bolsa durante a vigência do projeto.

¹ Fortuna, A. de O.; *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*, EDUSP (2000).

² Allen, M. P.; Tildesley, D. J.; *Computer Simulation of Liquids*, Oxford (1987).

³ Costa L.T e Ribeiro, M. C. C., *Química Nova*, no prelo.