



tecnun Universidad de Navarra

Descripción numérica de suspensiones coloidales densas a través de un canal rectangular

Proyecto Fin de Grado para optar al grado en Ingeniería Biomédica

Sara Arietaleaniz Coranti

Bajo la supervisión de Raúl Cruz Hidalgo

Septiembre 2015

Resumen

El presente informe describe el estudio numérico realizado en una suspensión coloidal densa a través de un canal rectangular. En primer lugar se realiza una introducción acerca de la simulación de suspensiones coloidales, y se resumen investigaciones previas que han sido de interés para este proyecto. A continuación, se establecen los objetivos de este trabajo, y se presenta la metodología empleada, además de describir el escenario y los valores escogidos de los parámetros. Después se especifica el criterio empleado para determinar el estado estacionario en cada caso. En los resultados, se analizan tanto el perfil de velocidades, como el grado de orden del sistema, en función de la fracción volumétrica de las suspensiones y la intensidad de los potenciales empleados entre las partículas. Se concluye que, además del incremento de la fracción volumétrica, el potencial a largo alcance también induce la no-linealidad del flujo. Sin embargo, valores pequeños de dicho potencial ejercen el efecto contrario. Por otro lado, el grado de orden del sistema tiende a una cúbica simple para valores bajos del potencial a largo alcance, mientras que para valores mayores la estructura se asemeja más a una hexagonal. Finalmente, se proponen posibles líneas futuras surgidas a partir de esta investigación.

Índice

1. Introducción: antecedentes y justificación.....	3
2. Objetivos.....	11
3. Metodología.....	11
3.1. Configuración del sistema.....	11
3.1.1. Condiciones de contorno y generación de flujo.....	12
3.1.2. Tamaño del sistema y fracción volumétrica de coloides..	12
3.1.3. Distribución inicial de los coloides.....	13
3.1.4. Interacciones entre coloides.....	13
3.1.4.1. Potencial <i>Soft-Sphere</i> (SP).....	14
3.1.4.2. Potencial <i>Lennard Jones</i> (LJ).....	15
3.2. Determinación del estado estacionario.....	17
3.2.1. Estimación del estado estacionario.....	18
3.2.2. Comprobación de la estimación.....	18
4. Resultados y discusión.....	20
4.1. Efecto del potencial <i>Soft-Sphere</i>	21
4.2. Efecto del potencial de <i>Lennard Jones</i>	23
4.3. Grado de orden del sistema.....	28
5. Conclusiones.....	32
6. Líneas futuras.....	32
7. Bibliografía.....	34

1. Introducción: antecedentes y justificación

Durante muchos años, desde el comienzo de la construcción de maquinarias modernas, los ingenieros han estado ejecutando ensayos para determinar la resistencia y quiebra de los materiales. Con el aumento del conocimiento general en la física de los materiales, la descripción de sus propiedades reológicas se ha convertido en un verdadero reto científico. Así, fluidos complejos y medios granulares ofrecen una oportunidad atractiva para combinar los intereses prácticos de la comunidad ingenieril con el estudio de modelos de relevancia en la física básica. La materia blanda es extensa tanto en la naturaleza como en los procesos industriales, e incluye una infinidad de materiales como pueden ser los polímeros, las emulsiones, las suspensiones de partículas sólidas u otros sistemas de interés biológico. De ese modo, comprender el comportamiento reológico de fluidos complejos conlleva a grandes retos y tiene un gran número de aplicaciones.

Una aplicación del estudio de fluidos complejos puede derivarse, por ejemplo, a examinar el flujo sanguíneo. La sangre es un fluido complejo compuesto fundamentalmente por el plasma sanguíneo glóbulos rojos, y continuamente entra y sale por vasos sanguíneos de diversos tamaños. En algunas patologías, el diámetro vascular es drásticamente reducido, obligando a la sangre a circular a través de un estrechamiento, incrementando la fracción volumétrica de partículas en circulación. Cuando la presencia de estas partículas o, mejor dicho, células sanguíneas (eritrocitos, leucocitos y plaquetas) es considerada, el escenario adquiere una mayor complejidad, y la geometría del vaso sanguíneo así como las propiedades de dichas partículas (e. g. tamaño) y las interacciones que puedan surgir entre ellas desempeñan un papel crucial. De este modo, el estudio reológico del torrente sanguíneo puede ayudar a caracterizar y hacer frente a estas patologías [1].

En los últimos años se han llevado a cabo numerosos estudios donde se ha descrito el comportamiento de fluidos complejos en diferentes escenarios, tanto de forma experimental como de forma numérica. Staben et al. (2004) estudiaron el movimiento de partículas circulando entre dos paredes paralelas (Poiseuille) a número de Reynolds bajos. El flujo de la suspensión se generó haciendo uso de una jeringuilla e induciendo un caudal en el rango $1.0 \leq Q \leq 25.0 \mu\text{L}/\text{min}$. Las partículas utilizadas tenían un diámetro que llegó a alcanzar un valor de 0.95 veces la anchura del canal en la dirección del confinamiento y se usaron suspensiones de fracciones volumétricas $\Phi \leq 0.01$. De ese modo se analizaron los perfiles de velocidad y las distribuciones de partículas en función de la geometría de entrada del canal. Los resultados mostraron que la velocidad de la partícula es retardada cuanto mayor es su tamaño, o cuanto más cerca se encuentra ésta de la pared. Por otro lado, se estudiaron dos tipos de entrada al canal: una entrada terminante o desafilada (donde el canal se estrecha bruscamente con un ángulo de 90°),

y otra entrada inclinada. Con el fin de aclararlo, se muestran las representaciones de los dos tipos de entrada de canal empleados:

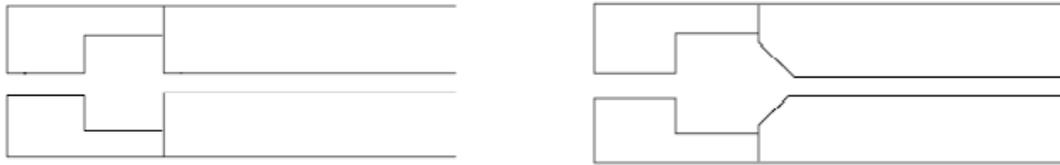


Fig. 1. Esquema de ambos tipos de entradas: a la izquierda, la entrada terminante/desafilada. A la derecha, la entrada inclinada [2].

Se observó que, las partículas pequeñas, al incorporarse al canal estrecho a través de la entrada terminante, se agrupaban lejos de las paredes y con tendencia a colocarse en el centro del canal. Por el contrario, en el caso de la entrada inclinada, las partículas mostraron un acercamiento a las paredes que se encuentran en la región de entrada [2].

Isa et al. (2007) realizaron un estudio experimental cuyo escenario es muy parecido al trabajo que se presentará en este informe. Analizaron el flujo de una suspensión coloidal cerca del empaquetamiento aleatorio denso en un canal rectangular. Observaron que el flujo consistía en un tapón en el centro, mientras que la fuerza cortante estaba localizada adyacente a las paredes del canal, mostrando así una semejanza a aquellos fluidos que necesitan un valor mínimo del estrés cortante para comenzar a fluir. Sin embargo, el ajuste de la velocidad con la variación del flujo es muy diferente a aquel que presentan aquellos fluidos que fluyen por encima de un punto de fluencia τ_0 . Los perfiles de velocidad observados pudieron ser descritos por una teoría de fluctuaciones del estrés cortante desarrollada originalmente para el flujo a través de canales de medios granulares secos. Esta afirmación pudo ser demostrada tanto para el caso de paredes lisas como para el caso de paredes rugosas [15].

Por su parte, Goyon et al. (2008) se centraron en el estudio de los materiales cristalinos amorfos, los cuales se comportan como fluidos complejos con propiedades intermedias entre los sólidos y los líquidos. Su característica fundamental fue que no presentaban una relación lineal entre la tensión y la tasa de deformación sufridas. Los autores hicieron uso de un velocímetro microfluídico para caracterizar el flujo de capas finas de emulsiones concentradas, las cuales fluían confinadas en canales de distinta anchura usando superficies con diferentes rugosidades. Se emplearon esferas de silicio de un diámetro aproximado de $6\mu\text{m}$, y una fracción volumétrica $\Phi=0.75$ (siendo la fracción volumétrica crítica para el atasco $\Phi=0.64$) y un canal rectangular de 14cm de largo y $250\mu\text{m}$ de ancho.

Como resultado, se observaron evidencias de efecto de tamaño finito (*finite-size effects*) en el comportamiento del flujo y la ausencia de reglas generales que gobernarán el comportamiento de estos sistemas. Así, la forma del perfil de velocidades varió con la anchura del canal para un mismo valor de tensión cortante. Además, las superficies más rugosas indujeron una mayor tasa de deformación para el mismo confinamiento y tensión cortante de la pared. Los resultados sugirieron que el flujo no se ajusta a un parámetro de orden estructural. Sin embargo, Goyon y coautores consiguieron mostrar una simple regla no-local que puede abarcar todos los perfiles de velocidad observados. En emulsiones concentradas, el flujo ocurre gracias a una sucesión de deformaciones elásticas reversibles y reorganizaciones plásticas irreversibles. Estos eventos plásticos localizados inducen una relajación elástica no-local y de largo alcance del estrés a lo largo del sistema. El número de reorganizaciones plásticas controla el flujo y la relajación del material. Una región dinámicamente activa inducirá la agitación de sus vecinos, y por consiguiente una mayor tasa de deformaciones plásticas. Se espera que los efectos no locales del estado de atasco afecten el flujo cuando el tamaño de la región de cooperación sea comparable con el tamaño de confinamiento. Para la fracción volumétrica estudiada en este caso, la longitud de la región de cooperación varió de 0 a $30\mu\text{m}$. En conclusión, se mostró que la escala de longitud que caracteriza la cooperatividad del flujo es diferente a la que caracteriza las heterogeneidades dinámicas de las fluctuaciones espontáneas. Mientras que estas heterogeneidades dinámicas presentan su máximo en el punto de atasco, la longitud de la región de cooperación no sólo no desaparece en la región de atasco, sino que aumenta su valor cuanto más entramos en esta región. Esto llevó a Goyon y su equipo a pensar que el comportamiento del flujo en materiales vítreos cerca del atasco implica mecanismos físicos diferentes a aquellos asociados a la transición vítrea. Se cree que la longitud de la región de cooperación del flujo mide la zona de influencia de los eventos plásticos localizados durante el flujo [3].

Başağaoğlu et al. (2008) desarrollaron un modelo de Lattice Boltzmann (LB) para simular el transporte acelerado de partículas densas e inertes en flujos de número de Reynolds bajo, a través de canales de paredes lisas y/o rugosas. Capturaron las transiciones entre los modos de migración de la partícula a través de un modelo de Lattice Boltzmann para suspensiones coloidales, variando la velocidad estacionaria del fluido, así como la viscosidad cinemática. Se simuló una única partícula inerte para eliminar los efectos causados por las interacciones hidrodinámicas partícula-partícula en la trayectoria de éstas. Además, se establecieron condiciones de contorno no deslizantes (*no-slip*) o esquema de rebote en las paredes paralelas a la dirección del flujo, y condiciones de contorno periódicas en la entrada y salida del canal. Se estableció una longitud de canal 75 veces mayor que su anchura, y se determinó un radio de partícula de 7.5 unidades de red. Por otro lado, la rugosidad de ambas paredes fue establecida añadiendo desplazamientos aleatorios distribuidos uniformemente a lo largo de un rango en dirección perpendicular a la pared.

Estas simulaciones fueron llevadas a cabo en dos dimensiones, y proporcionaron únicamente una indicación cualitativa del comportamiento de sistemas tridimensionales. Los resultados mostraron que, después de un estado transitorio inicial, una partícula inicialmente inmóvil se mueve de forma más rápida que la velocidad media del fluido. La sensibilidad del tiempo de residencia de la partícula dentro del canal con respecto a la rugosidad de la pared aumentó según disminuía el número de Reynolds. La relación entre la posición de salida de la partícula y el tiempo de residencia fue sensible a la posición inicial, la fuerza del flujo y la rugosidad de la pared. Una partícula con una densidad 5% mayor que la densidad del fluido migró a una posición de equilibrio entre el centro del canal y la pared para los flujos con menor velocidad y canales con paredes rugosas. Sin embargo, una partícula con una densidad 35% mayor que la del fluido migró al centro del canal en los flujos más lentos, debido al efecto de sedimentación gravitacional. La diferencia del tiempo de residencia entre la partícula menos densa y la más densa fue más sensible a la rugosidad de la pared en el fluido con el número de Reynolds más bajo estudiado ($Re=9.29$) [4].

Michailidon et al. (2009) investigaron el movimiento Browniano de coloides esféricos impenetrables que se encuentran cerca de una pared sólida, haciendo uso de la dinámica de la luz dispersada de una onda evanescente (*Evanescent Wave Dynamic Light Scattering, EWDLs*), técnica que combina la dispersión de la luz con la pequeña profundidad de penetración de una onda fugaz bajo circunstancias de reflexión interna total. Emplearon esferas de PMMA de varios tamaños (radio=183nm, 154nm y 118nm), consiguiendo una fracción volumétrica Φ de hasta $\Phi = 0.65$ para el caso del tamaño de radio de 154nm y 118nm. Mientras que en el régimen diluido la difusión cerca de la pared fue considerablemente reducida debido a las interacciones hidrodinámicas entre la partícula y la pared, conforme aumentaba la fracción volumétrica, el efecto que generaba la presencia de la pared fue disminuyendo progresivamente. En esta situación, la partícula no diferenciaba si estaba cerca de otra partícula o si se encontraba cerca de la pared; en otras palabras, las partículas sentían la presencia de la pared como si fuera otra partícula de mayor tamaño.

También se presentó un nuevo análisis de EWDLs para la difusividad individual y colectiva de las partículas, aplicable a cualquier valor de fracción volumétrica; y un modelo simple para la auto-difusión que describe las interacciones hidrodinámicas entre partícula-pared y partícula-partícula. Se predijo, mediante simulaciones de la dinámica Stokes-iana, una caída más débil del coeficiente de difusión individual cerca de la pared con el incremento de la fracción volumétrica [5].

Haciendo referencia al trabajo realizado por Isa et al. (2007), Genovese et al. (2011) exploraron la complejidad adicional que aparece cuando el canal es parcialmente bloqueado por una constricción en el centro. La reducción del flujo de partículas debida a esta constricción implica un aumento en la densidad de partículas, formando dominios cristalinos. Se establece un equilibrio dinámico caracterizado por grandes fluctuaciones en la velocidad instantánea del flujo, así como en la densidad local.

Edmond et al. (2012) estudiaron la influencia del confinamiento en las heterogeneidades dinámicas de una suspensión coloidal densa. Se empleó una fracción volumétrica $\Phi = 0.42 \pm 0.05$ de una suspensión binaria, con coloides de dos tamaños diferentes (radio = $1.18\mu\text{m}$ y $1.55\mu\text{m}$ respectivamente), permitiéndoles así conseguir una fracción volumétrica mayor que si se tratara de una suspensión con un único tamaño de coloide. Las partículas sufrían una ligera interacción repulsiva entre ellas, además de la interacción *hard-sphere*. El canal constaba de dos paredes casi-paralelas (con una ligera forma de cuña prácticamente despreciable). Los resultados que obtuvieron sólo corresponden a las partículas pequeñas (fueron las únicas sometidas a un proceso de tinción, y por lo tanto, las únicas que pudieron ser observadas en el microscopio confocal de barrido a láser). Pudieron observar cómo la morfología de las regiones de reorganización cooperativa (CRR) cambiaba en función del confinamiento y la formación de una capa de partículas cerca de las paredes. También pudieron ver que con el confinamiento se formaban unas capas densas de coloides (más planas cuanto mayor es el confinamiento). Estas capas eran más densas en la superficie de cristal del canal (es decir, en las paredes). Las inhomogeneidades estructurales inducidas por estas capas densas conllevaron a inhomogeneidades en la dinámica del sistema. De esta forma, las partículas se movían más fácilmente dentro del plano en el que se encontraban, pero seguían moviéndose más despacio que si el canal no estuviera confinado. Estas partículas se reorganizaban cooperativamente en el plano en el que se encontraban, pero rara vez interactuaban con partículas que se encontraban en otros planos, por lo que las CRR ocurrían principalmente en grupos bidimensionales de partículas. En resumen, la reorganización de estas regiones explicó la ralentización de la dinámica del sistema [6].

En su trabajo Nikoubashman et al. (2012) estudiaron la propagación de una única partícula neutra y flotante bajo un flujo generado por diferencia de presión a través de simulaciones que contabilizan de forma correcta las interacciones hidrodinámicas. Se conjugaron dos técnicas: por un lado, los algoritmos de la dinámica molecular (MD), donde las trayectorias de las moléculas son determinadas resolviendo de forma numérica las ecuaciones de Newton del movimiento. Por otro lado, la dinámica de colisión entre múltiples partículas (MPCD). En ésta última se alternan dos procesos: la corriente o el torrente, y el proceso de colisión. En ambos casos se asume que las partículas del solvente no actúan entre ellas. La unión entre el solvente y las partículas del soluto se realiza mediante un intercambio de momento. Durante la corriente, las partículas del solvente se mueven de forma balística, mientras que en el proceso de colisión, las partículas son agrupadas en celdas y sufren colisiones estocásticas con las partículas que se encuentran dentro de la misma celda. El gradiente de presión se generó creando una aproximación gravitacional ponderada por el parámetro g . En la primera parte del análisis, se consideró una geometría del sistema que consistía en dos paredes paralelas, donde se observó buena concordancia con los resultados experimentales.

En la segunda parte del estudio, se simuló el flujo de partículas a través de un array hexagonal compuesto por obstáculos cilíndricos, como se puede observar en la imagen.

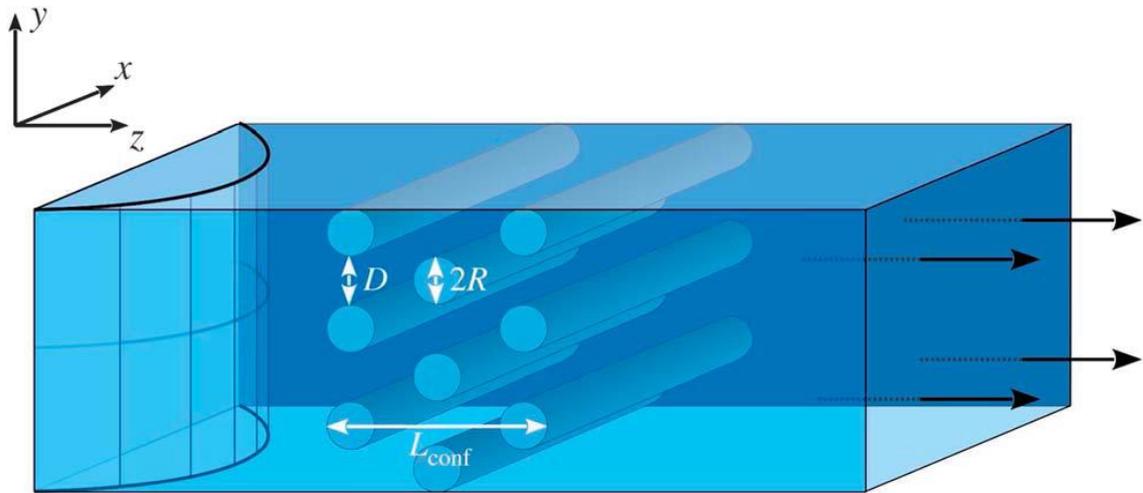


Fig. 2. Representación esquemática de la segunda parte de la simulación [7].

En esta segunda parte observaron que la presencia de obstáculos generaba una ralentización significativa de las partículas, y que sus velocidades respondían de forma altamente no lineal a un incremento del gradiente de presión [7].

Siguiendo por el mismo camino que el estudio realizado en 2008, esta vez Başığaoğlu et al. (2013) emplearon modelos de Lattice Boltzmann para suspensiones coloidales en dos y tres dimensiones. Simularon la velocidad y la deriva de partículas a través de un microcanal con obstáculos rectangulares en las paredes, con intención de comparar la trayectoria de las partículas obtenida de forma experimental con las simulaciones mediante el método de LB. Para la observación experimental se empleó una celda de 3.75mm de largo, y 0.45mm de ancho, cuyas paredes contenían obstáculos rectangulares de 80 micras de profundidad. Se empleó una solución monodispersa de esferas de poliestireno de radio=25 μ m. Se generó un flujo de 3 μ L/min, donde las partículas en suspensión eran 5% más densas que el fluido. Se utilizó un microscopio para capturar las posiciones y un código de Matlab personalizado para calcular las velocidades de las partículas a partir de las posiciones obtenidas.

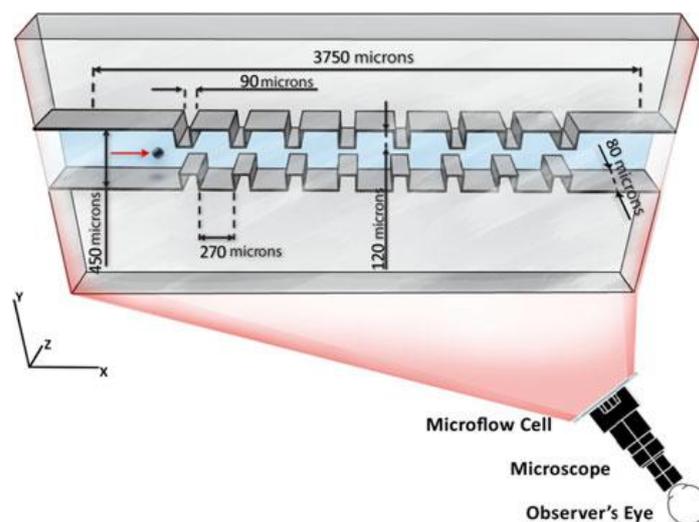


Fig. 3. Esquema del microcanal empleado para la observación experimental [8].

Para las simulaciones numéricas, se emplearon condiciones de contorno periódicas en la entrada y salida del canal, y el esquema de rebote en las paredes.

Se consideraron dos partículas: una más cercana a una de las dos paredes del canal, y la otra más cercana al centro de canal. Solamente las trayectorias planas o bidimensionales pudieron ser extraídas de la observación por microscopio.

Se pudo observar cómo la reducción del número de Reynolds (Re) por un factor del radio de la partícula en unidades de red resultó en una alta correspondencia entre las velocidades de las partículas obtenidas de forma experimental y de forma numérica, indicando de esta forma que un escalado dimensional basado en el número de Reynolds es necesario para capturar la dinámica del fluido en tres dimensiones, partiendo de simulaciones bidimensionales. También se capturó el desplazamiento de partículas en el canal con obstáculos simétricos en las paredes, donde la simetría del flujo fue destruida por perturbaciones locales generadas por el movimiento de partículas, indicando que la asimetría en la geometría del canal no es la única causa para el desplazamiento de partículas.

Por otro lado, la aceleración/desaceleración de cada partícula alrededor de cada obstáculo siguió el mismo patrón, pero cada obstáculo actuó como un acelerador de partículas en las simulaciones en 2D y 3D, donde las partículas expusieron velocidades progresivamente mayores en cada obstáculo. Las partículas migraron a otros planos paralelos a la dirección del flujo en las zonas convergentes y divergentes del flujo. La monotonidad en la aceleración de la partícula durante el acercamiento al obstáculo y la desaceleración durante el alejamiento fue destruida por las interacciones hidrodinámicas entre las partículas, lo que implicó migraciones más pronunciadas a otros planos paralelos al flujo [8].

Nikoubashman et al. (2014) llevaron a cabo simulaciones por ordenador para estudiar el comportamiento del flujo de coloides esféricos en la nanoescala. Los coloides fueron sumergidos en un solvente viscoelástico bajo un flujo de Poiseuille. El sistema fue confinado en un canal rectangular, donde se simuló la presencia de dos paredes paralelas en el eje X, a una distancia variable $L_x=96$ (12 veces el diámetro del coloide para un valor de diámetro $\sigma_c=8$), $L_x=64$ ($8*\sigma_c$) y $L_x=60$ ($7.5*\sigma_c$). Se aplicaron condiciones de contorno periódicas en las direcciones Y y Z. La viscoelasticidad del solvente se generó introduciendo cadenas de polímeros de longitud del mismo orden de magnitud que los coloides. La viscoelasticidad del medio se ajustó a través de la longitud y concentración de las cadenas poliméricas. Se escogió un diámetro de las esferas que componen el polímero de $\sigma_m=1$.

El solvente se simuló a través del algoritmo de la dinámica de colisión entre múltiples partículas (*MPCD*), el cual consiste, como se ha mencionado anteriormente, en dos pasos que se van alternando: la corriente/torrente y el proceso de colisión. Una vez realizadas las simulaciones, se observó un flujo estacionario de coloides en el centro del canal para números bajos e intermedios de Reynolds. Cuando el número de Reynolds superó un valor crítico Re_c , las fuerzas inerciales se superpusieron a este evento, creando un decaimiento abrupto en el pico de densidad del centro del canal.

El valor específico de Re_c dependía intensamente de las propiedades viscoelásticas del medio, y se encontró que la concentración de los coloides en el centro del canal podía ser preservada para un mayor rango de Re simulando polímeros más largos y mayores concentraciones de los mismos [9].

Hemos podido observar cómo se ha estudiado el flujo de suspensiones coloidales en diversos escenarios, tanto de forma experimental como de forma numérica. En el presente trabajo hemos descrito numéricamente el comportamiento de suspensiones coloidales densas, al fluir a través de un canal rectangular mediante el método de Lattice-Boltzmann. Durante su ejecución hemos estudiado de forma sistemática la influencia de la fracción volumétrica en la respuesta de sistema ante un gradiente de presión constante. Además, se han ejercitado dos tipos de interacciones potenciales entre partículas y se ha estudiado la influencia que puede tener la intensidad de dichos potenciales en el perfil de velocidades de la suspensión. Por otro lado, también se ha explorado el grado de orden que se establece en estos sistemas para tiempos largos tanto en el centro del canal como cerca de las paredes.

2. Objetivos

El objetivo del presente proyecto es estudiar el comportamiento de una suspensión coloidal densa confinada entre dos paredes paralelas. Se pretende observar cómo varía el perfil de velocidades en la región cercana al atasco en función de:

- El tamaño del sistema, o, en otras palabras, la fracción volumétrica de coloides (para una misma cantidad de coloides, cuanto menor sea el tamaño del sistema empleado, obtendremos una fracción volumétrica mayor).
- La intensidad de los potenciales que caracterizan las interacciones entre los coloides
 - Potencial *Soft Sphere*
 - Potencial de *Lennard Jones*

3. Metodología

Las simulaciones han sido llevadas a cabo mediante el programa *Ludwig*, un conjunto de códigos en paralelo escritos en lenguaje C que se basan en el método de Lattice Boltzmann para la simulación de fluidos complejos. Una descripción más profunda puede ser encontrada en el informe “*Introducción a conceptos básicos del método de Lattice Boltzmann para la simulación de fluidos complejos*” desarrollado para las prácticas del grado.

3.1. Configuración del sistema

El sistema simulado consta de un canal rectangular, con dos paredes paralelas orientadas de forma paralela al flujo (cuyo sentido está indicado mediante las flechas rojas), el cual está compuesto por una suspensión coloidal de fracción volumétrica variable.

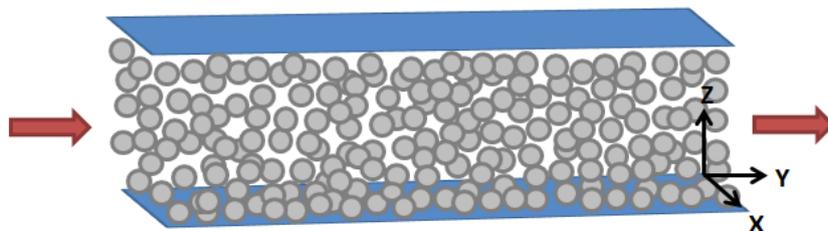


Fig. 4. Esquema de la configuración de la simulación.

3.1.1. Condiciones de contorno y generación de flujo

La presencia de las paredes se ha indicado en el input de *Ludwig*, donde se ha especificado al código que establezca como pared aquellos nodos cuya componente en Z sea cero o el valor máximo posible en esa misma dirección. Se han establecido condiciones de contorno periódicas a la entrada y a la salida del flujo en la dirección Y, así como a los lados (dirección X).

Por otro lado, el flujo ha sido generado imponiendo un gradiente de presión uniforme aplicado a todos los nodos del espacio (excepto a aquellos que han sido establecidos como pared) en la dirección Y, haciendo que los coloides se desplacen en dirección paralela a las paredes. El valor de dicho gradiente de presión se ha mantenido constante durante las simulaciones, con un valor de $\nabla p = 5 \cdot 10^{-5}$.

3.1.2. Tamaño del sistema y fracción volumétrica de coloides

Como se ha mencionado en el informe correspondiente a las prácticas de grado, el radio del coloide debe ser mayor que el espaciado entre nodos de la red, y su valor depende de la fracción volumétrica de las partículas sólidas. Para fracciones volumétricas altas (>0.4), se deben considerar radios mayores que 2.5 veces el espaciado entre dos nodos contiguos si se quieren obtener simulaciones precisas y minimizar los errores que introduce la discretización del sistema. Para las simulaciones llevadas a cabo, se ha escogido un radio hidrodinámico de partícula de 5.2 (el radio hidrodinámico hace referencia al radio de volumen esférico que cualquier partícula, no necesariamente esférica, ocupa en su desplazamiento acompañado de su libre rotación [13]), y un número total de 1000 partículas. De esta forma, la fracción volumétrica de partículas dentro de nuestro sistema se puede calcular a través de la siguiente fórmula:

$$\text{Fracción volumétrica, } \Phi = \frac{\text{número coloides} * \text{volumen coloide}}{\text{volumen sistema}}$$

Por lo tanto, si tenemos 1000 partículas, cada una de ellas de radio hidrodinámico de 5.2 veces el espaciado entre los nodos, el volumen total que ocuparán los coloides será:

$$1000 \times \frac{4}{3} \pi \times 5.2^3 = 588977.41$$

A lo largo de todas las simulaciones, se ha establecido la misma cantidad de nodos en todas las direcciones (X, Y y Z). Sin embargo, con el fin de poder variar la fracción volumétrica, se ha variado el tamaño del sistema manteniendo la misma cantidad de coloides. Los valores elegidos han sido 120, 112 y 104 nodos para las tres direcciones. De esta forma se han conseguido las siguientes fracciones volumétricas:

$$\Phi_1 = \frac{1000 \times \frac{4}{3} \pi \times 5.2^3}{120^3} = 0.34$$

$$\Phi_2 = \frac{1000 \times \frac{4}{3} \pi \times 5.2^3}{112^3} = 0.42$$

$$\Phi_3 = \frac{1000 \times \frac{4}{3} \pi \times 5.2^3}{104^3} = 0.52$$

3.1.3. Distribución inicial de los coloides

En un principio, los coloides han sido distribuidos uniformemente en el espacio, formando cubos acomodados en la geometría del sistema. Sin embargo, debido a la elevada fracción volumétrica de coloides, el sistema demoraba mucho tiempo en desordenarse. Por esta razón, se ha hecho uso de un código externo propuesto por Skoge et al. (2006) para poder acomodar las partículas, desde un principio, de forma aleatoria. El algoritmo sitúa esferas dentro de un volumen determinado de forma aleatoria; después, las acomoda dentro variando su radio y haciendo que ellas se muevan. Variando la energía inicial del sistema, y el número de veces que dejamos que estas partículas se muevan, logramos generar diferentes fracciones volumétricas.

3.1.4. Interacciones entre coloides

Las partículas de suspensiones coloidales pueden interactuar de formas muy diversas. En este trabajo se han utilizado dos tipos de interacción entre los coloides: el potencial *Soft-Sphere* y el potencial de *Lennard Jones*. De ese modo hemos ejecutado un estudio sistemático analizando la influencia que puede tener la intensidad de estos potenciales en el perfil de velocidades de los coloides, además de si existe alguna diferencia entre la

presencia del potencial *Soft-Sphere* por sí solo, y la presencia conjunta del potencial *Soft-Sphere* y el potencial *Lennard Jones*.

3.1.4.1. *Soft-Sphere Potential (SP)*

El modelo más simple del potencial entre coloides es el potencial de *Soft-Sphere*, o *Soft Potential*, en el cual las moléculas se mueven de forma libre y no interactúan entre ellas a menos que se produzca una colisión. El potencial intermolecular es descrito mediante la siguiente fórmula,

$$u(r_{ij}) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n, \quad \forall r_{ij} \leq \sigma$$

$$u(r_{ij}) = 0, \quad \forall r_{ij} > \sigma$$

Donde n es una constante, ε es una medida de la fuerza de las interacciones intermoleculares y σ es el diámetro de la molécula. De esta forma, las moléculas ejercen fuerza una sobre la otra solamente cuando se chocan.

Se asume que las colisiones son puramente elásticas. Por esto, haciendo uso de la conservación del momento lineal y la energía cinética de dos moléculas de la misma masa que colisionan,

$$mv_1 + mv_2 = mV_1 + mV_2,$$

donde v_1 y v_2 son las velocidades de las partículas 1 y 2 antes de la colisión, y V_1 y V_2 son las velocidades de esas mismas dos partículas después de la colisión.

En el caso tridimensional, como resultado de la colisión, la componente de la velocidad que está alineada con la dirección que une los centros de masa de ambos coloides será intercambiada. Consideraremos tres ejes ortogonales \hat{r}_{12} , \hat{j} y \hat{k} , donde \hat{r}_{12} es el eje que va en la dirección que une ambos centros de masa. De esta forma, si la velocidad inicial de la partícula 1 es:

$$\vec{v}_1 = (v_1 \hat{r}_{12})\hat{r}_{12} + (v_1 \hat{j})\hat{j} + (v_1 \hat{k})\hat{k}$$

Su velocidad después de la colisión será:

$$\vec{V}_1 = (V_1 \hat{r}_{12})\hat{r}_{12} + (V_1 \hat{j})\hat{j} + (V_1 \hat{k})\hat{k}$$

Las velocidades antes y después de la colisión para la partícula 2 serán v_2 y V_2 respectivamente. Después de la colisión, las velocidades resultantes en la dirección \hat{r}_{12} serán:

$$\vec{V}_1 \hat{r}_{12} = \vec{v}_2 \hat{r}_{12} \quad \text{y} \quad \vec{V}_2 \hat{r}_{12} = \vec{v}_1 \hat{r}_{12}$$

Durante las simulaciones, se han estudiado dos valores de intensidad del *Soft Potencial*:

- ε (SP) = 0.4
- ε (SP) = 0.5

Para algún caso específico también se han introducido los valores ε (SP)=0.3 y ε (SP)=0.6.

3.1.4.2. Potencial Lennard Jones (LJ)

El potencial de *Lennard Jones* implica la existencia de interacciones de largo alcance. Así, a grandes distancias, la fuerza entre coloides es atractiva, mientras que a cortas distancias, esta fuerza se vuelve repulsiva. La dependencia viene determinada a través de la siguiente fórmula:

$$u(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

σ se refiere a la distancia a la cual el potencial intermolecular entre dos partículas es nulo. Su valor aporta una idea de cuánto se pueden aproximar dos partículas antes de que la fuerza entre ellas se vuelva repulsiva.

A continuación se muestra una representación gráfica de este potencial, donde se pueden diferenciar la región atractiva y la región repulsiva.

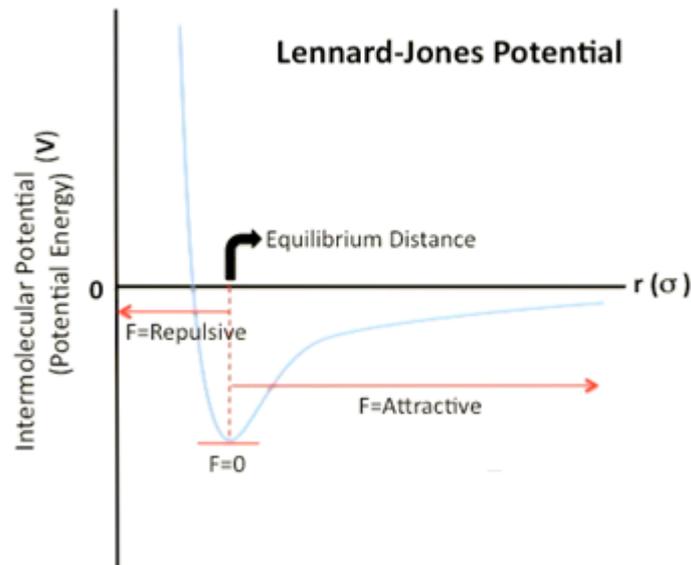


Fig. 5. Valor del potencial de *Lennard Jones* entre dos partículas, en función de la distancia entre ambas [18].

Durante las simulaciones, se ha variado sistemáticamente el valor de ϵ , describiendo la respuesta del sistema a medida que la interacción a largo alcance se hace más intensa. Se han empleado los siguientes valores para la intensidad del potencial de LJ:

- $\epsilon(\text{LJ})=0$
- $\epsilon(\text{LJ})=0.005$
- $\epsilon(\text{LJ})=0.5$

También se han empleado cuatro valores extra (0.01, 0.05, 0.1 y 0.3) para poder estudiar con más detalle algún caso concreto.

A continuación se muestra una tabla que contiene todas las combinaciones de las variables empleadas en las simulaciones:

Parámetros constantes:

- Gradiente de presión, $\nabla p = 5 \cdot 10^{-5}$
- Número de coloides, $n = 1000$

ϵ (SP)	ϵ (LJ)	Tamaño sistema (fracción volumétrica)
0.3	0	104 (0.52)
0.4	0	120 (0.34)
0.4	0	112 (0.42)

0.4	0	104 (0.52)
0.4	0.005	120 (0.34)
0.4	0.005	112 (0.42)
0.4	0.005	104 (0.52)
0.4	0.5	120 (0.34)
0.4	0.5	112 (0.42)
0.4	0.5	104 (0.52)
0.5	0	120 (0.34)
0.5	0	112 (0.42)
0.5	0	104 (0.52)
0.5	0.005	120 (0.34)
0.5	0.005	112 (0.42)
0.5	0.005	104 (0.52)
0.5	0.01	104 (0.52)
0.5	0.05	104 (0.52)
0.5	0.1	104 (0.52)
0.5	0.3	104 (0.52)
0.5	0.5	120 (0.34)
0.5	0.5	112 (0.42)
0.5	0.5	104 (0.52)
0.6	0	104 (0.52)

Tabla 1. Todas las combinaciones de los parámetros variables entre las simulaciones.

3.2. Determinación del estado estacionario

Para el caso de sistemas diluidos, las simulaciones se ejecutaron durante 100 000 ciclos; por su parte, para sistemas densos, fue necesario ejecutar 200 000 ciclos. En todos los casos, los tiempos de ejecución fueron mayores que $200 \times t_c$, donde t_c está definido como el tiempo que invierte el coloide en desplazarse su propio diámetro $t_c = \frac{D}{v_m}$. Los archivos que las simulaciones nos devuelven contienen la posición del centro de masa de los coloides en las direcciones X, Y y Z, además de la componente de la velocidad en cada una de estas tres direcciones.

Todos los resultados que se analizarán en el apartado 4 pertenecen al estado estacionario del flujo. Para poder determinar si los archivos analizados se encuentran en el estado estacionario, se ha desarrollado una herramienta en MATLAB® que sigue los pasos descritos en los siguientes apartados.

3.2.1. Estimación del estado estacionario

En primer lugar, se ha optado por elegir un intervalo estrecho (20 000 ciclos), el cual, se cree que ha alcanzado el estado estacionario. En todos los casos el tiempo característico t_c ronda alrededor de 200 ciclos de *Ludwig*, lo que implica que para un intervalo de 20 000 ciclos, la partícula ha recorrido 100 veces su tamaño. Se han promediado los perfiles de velocidad en la dirección Y en función de la cercanía a la pared (Velocidad en la dirección Y (V_y) vs. Posición en el eje Z (z)) de todos los instantes que se encuentran dentro de dicho intervalo. Para esto, en primer lugar se han ordenado las V_y en función de su valor en z (de menor a mayor). Después, se han promediado las posiciones en z , junto con las V_y , y el promedio obtenido ha sido aproximado a un polinomio.

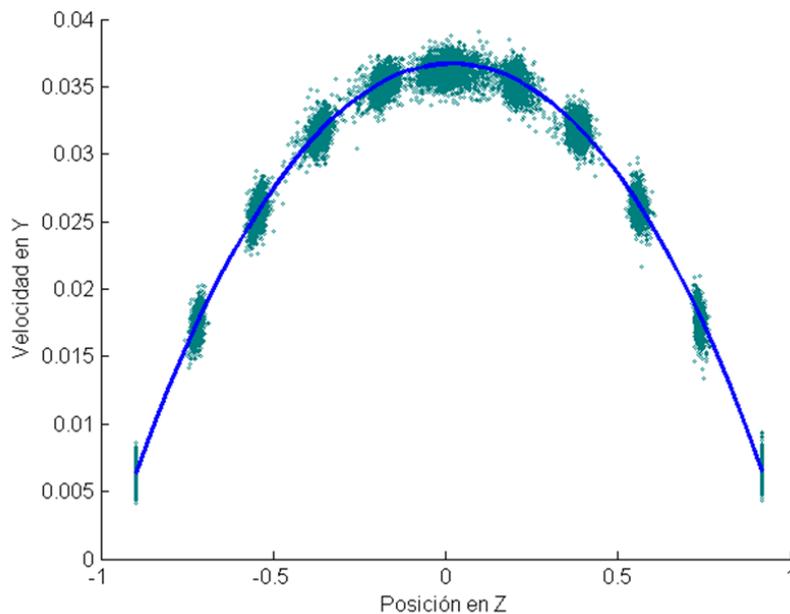


Fig. 6. Perfil de velocidades de un intervalo considerado como estado estacionario. Las circunferencias verdes corresponden a los resultados de la simulación. La función azul representa la aproximación de los datos obtenidos a un polinomio.

3.2.2. Comprobación de la estimación

Una vez estimado el perfil de velocidades en el estado estacionario, se ha comparado dicha estimación con el perfil de velocidad de los archivos que vienen a continuación. Para ello, se ha utilizado el error cuadrático medio (ECM),

$$ECM = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2$$

donde \hat{Y} es el estado estacionario estimado e Y es el valor del perfil de velocidades de un instante determinado, siendo n la longitud de la matriz que contiene el perfil de velocidades (V_y vs. z).

La siguiente figura ilustra el error cuadrático medio (en % respecto al valor máximo de velocidad) de todos los instantes de tiempo (desde el inicio de la simulación hasta el final) respecto de la estimación del estado estacionario. Podemos observar cómo al comienzo, el sistema se encuentra en un estado transitorio que conforme avanza el tiempo se va acercando a lo que parece ser el estado estacionario.

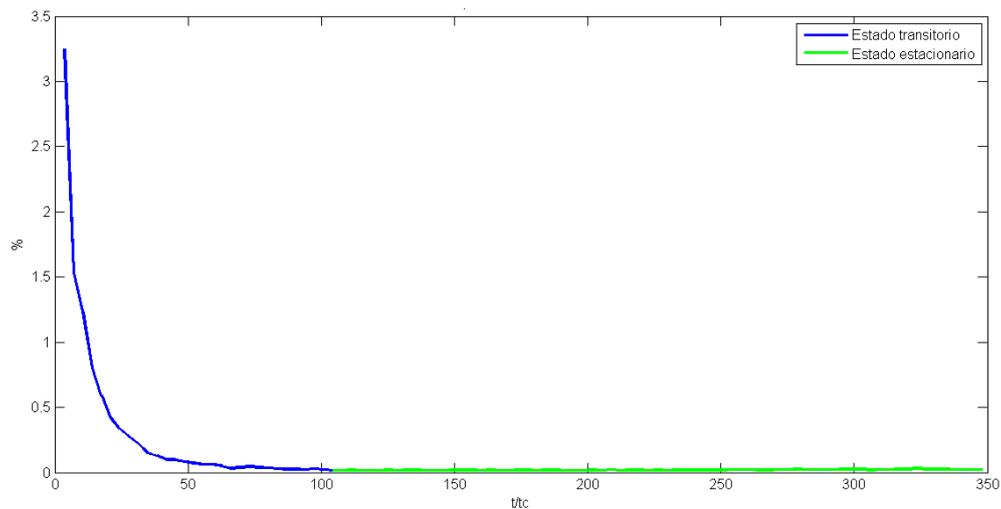


Fig. 7. Error cuadrático medio de todos los instantes de la simulación respecto al estado estacionario.

La línea verde indica que el sistema ha alcanzado el estado estacionario, según criterio utilizado en este trabajo. Debemos tener en cuenta que dentro del estado estacionario también puede haber fluctuaciones. En la figura 7 no se pueden apreciar debido a la escala de la gráfica, pero si ampliamos la zona correspondiente al estado estacionario, como se puede observar en la figura 8, podemos apreciar las fluctuaciones existentes.

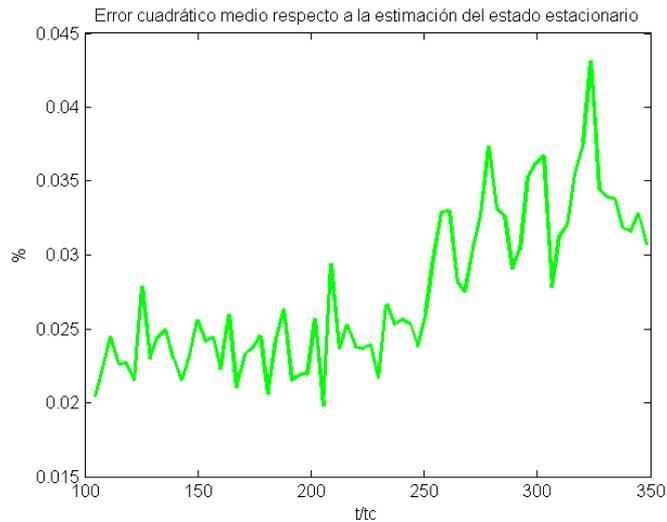


Fig. 8. Evolución del error cuadrático medio en el tiempo, para la estimación del estado estacionario.

El tiempo que el sistema demora en alcanzar el estado estacionario, además de la intensidad de las fluctuaciones, puede variar según el caso estudiado. Para los casos más diluidos, por ejemplo, el sistema demora más en alcanzar el estado estacionario, pero una vez alcanzado, las fluctuaciones son muy pequeñas. Por el contrario, para el caso más denso, el sistema se encuentra en el estado estacionario prácticamente desde el comienzo de la simulación, pero la intensidad de las fluctuaciones es mucho mayor, llegando a alcanzar el 1.4-1.5%.

4. Resultados y discusión

Una vez que el sistema ha alcanzado el estado estacionario y se haya obtenido un promedio del perfil de velocidades, se discutirán varios aspectos de las simulaciones llevadas a cabo:

- La variación del perfil de velocidades en función de la fracción volumétrica y la intensidad de los potenciales de *Soft Sphere* y *Lennard Jones*
- La variación de la velocidad en el centro del canal en función de la intensidad de los potenciales *Soft Sphere* y *Lennard Jones*
- El grado de orden del sistema a través de la función de correlación radial

Todos los casos simulados constan de un valor bajo del número de Reynolds.

4.1. Efecto del potencial *Soft Sphere* (SP)

En primer lugar estudiaremos la influencia que tiene la intensidad del potencial *Soft Sphere* en el perfil de velocidades del sistema. En la figura 9 podemos observar cómo la intensidad del potencial SP apenas influye en el perfil de velocidades de una solución diluida, como $\Phi=0.34$. El perfil de velocidades normalizado se aproxima mucho a aquel que corresponde a un fluido 100% Newtoniano.

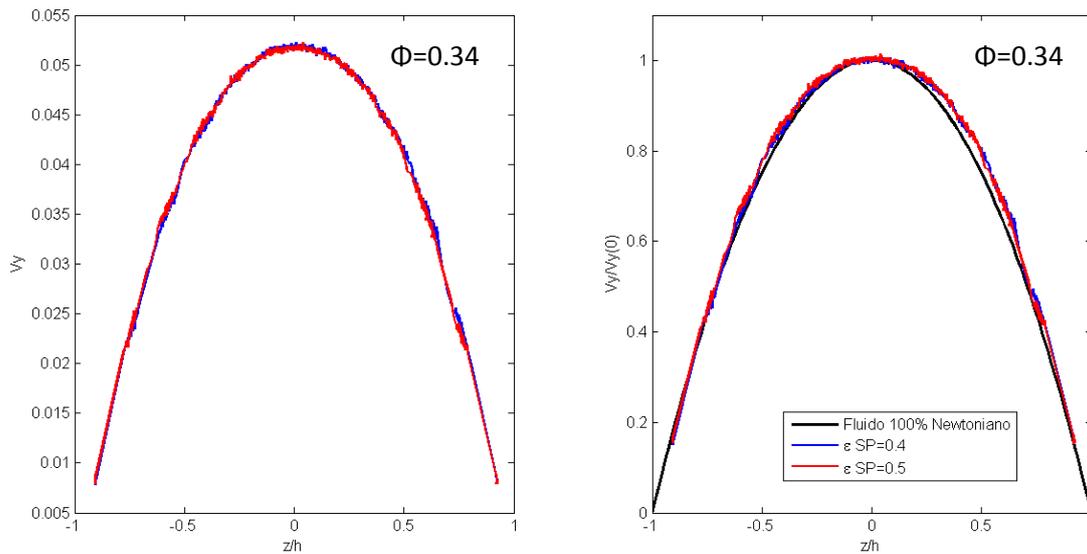


Fig. 9. Perfiles de velocidad [primera columna]; Valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro [segunda columna]. Se estudia la influencia del SP en perfil de velocidades de una suspensión con $\Phi=0.34$. $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

En principio este es un resultado esperado. El movimiento de las partículas está totalmente correlacionado con el movimiento del líquido, debido a que las interacciones hidrodinámicas de largo alcance no son lo suficientemente importantes como para entorpecer el movimiento del sistema. De hecho, la funcionalidad de la curva re-escalada podría derivarse a partir de los parámetros de viscosidad, gradiente de presión y anchura del canal.

Veamos entonces si el potencial SP tiene influencia sobre soluciones más densas ($\Phi=0.52$, por ejemplo). Casos más concentrados muestran una no linealidad muy notable; en otras palabras, la respuesta se aleja más de aquella que corresponde al fluido puramente Newtoniano.

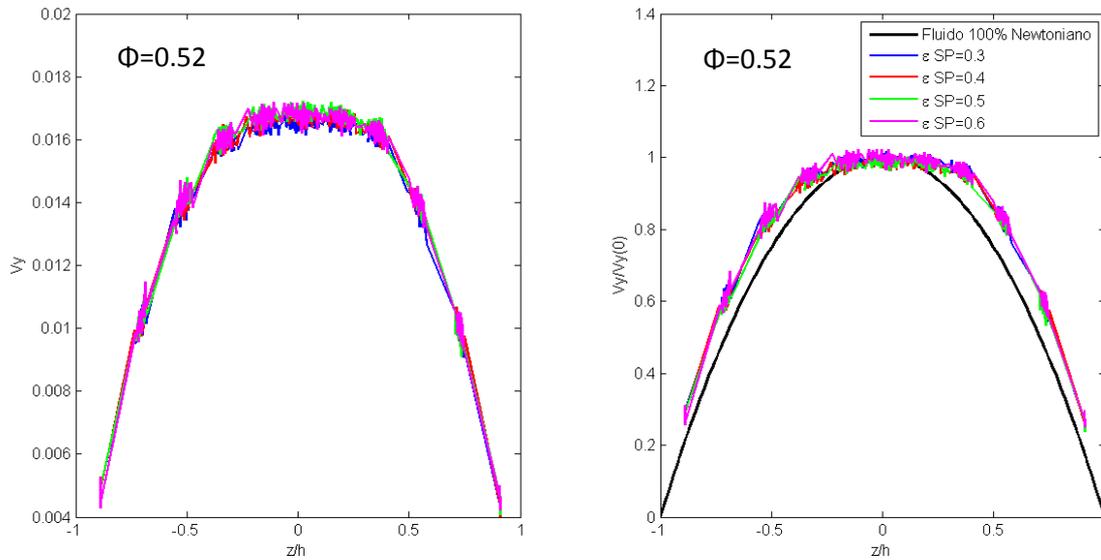


Fig. 10. Perfiles de velocidad [primera columna]; Valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro [segunda columna]. Se estudia la influencia del SP en el perfil de velocidades de una suspensión con $\Phi=0.52$. $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

En la figura 10, se ilustra un estudio sistemático de la influencia de la intensidad del SP. Es llamativo que el valor del potencial de SP no influye notablemente ni en la funcionalidad del perfil de velocidades, ni en el valor de velocidad máxima dentro del canal. Esto nos lleva a pensar que este alejamiento del comportamiento Newtoniano es principalmente motivado por un aumento en la fracción volumétrica, y que la influencia de la intensidad del potencial del SP es relativamente pequeña. Además, el escalado de las curvas indica que la intensidad del potencial SP no determina la reología del sistema. En conclusión, la ley constitutiva será la misma.

Por otro lado, en la figura 10 también se pueden apreciar cómo las partículas tienden a agruparse en un mismo plano XY , por lo que podemos deducir que su reorganización ocurre principalmente en planos paralelos a la dirección de propagación, conclusiones que concuerdan con los estudios de Edmond et al. (2012).

Para concluir el estudio de la influencia del potencial SP, mostramos el valor de la velocidad en el centro del canal como función de la intensidad de dicho potencial.

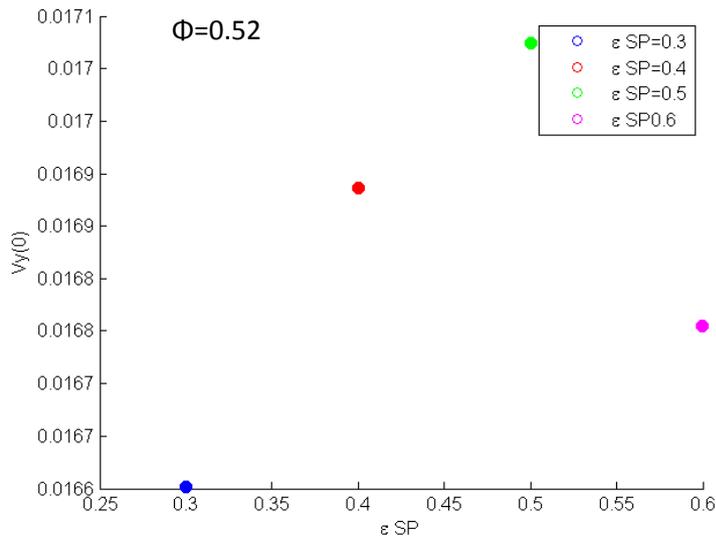


Fig. 11. Influencia del potencial SP en la velocidad del centro del canal para suspensiones con $\Phi=0.52$.

A pesar de que solamente contamos con cuatro valores, podemos ver cómo la variación de la velocidad en el centro del canal es muy pequeña, y se espera que para valores mayores del SP, converja a un valor constante caracterizado por la velocidad convectiva generada por el gradiente de presión en el canal.

4.2. Efecto del potencial de *Lennard Jones* (LJ)

En un principio, se decidió estudiar sistemáticamente la influencia del potencial de *Lennard Jones* por sí solo y después la influencia de ambos potenciales a la vez. Sin embargo, profesionales que llevaban trabajando varios años con *Ludwig*¹ nos informaron que no habían logrado simular sistemas coloidales, con altas fracciones volumétricas usando solo el potencial de *Lennard Jones*, y que siempre era necesario incluir una interacción local de tipo potencial *Soft Sphere*. Hemos podido esclarecer que, en las condiciones de confinamiento estudiadas, al no incluir el término de SP, las partículas se solapaban demasiado antes de que la interacción repulsiva de corto alcance del potencial *Lennard Jones* fuera lo suficientemente fuerte como para separarlas, y por lo tanto el programa no era capaz de definir las interacciones entre coloides. Es por esto que en estos cálculos siempre hemos incluido la interacción de corto alcance SP. Asimismo, los valores de la intensidad del potencial de LJ se variaron sistemáticamente entre 0 y 0.5, siguiendo también el criterio de los expertos. Queda por

¹ Pagonabarraga, I. Alarcón, F. 2015. Comunicación personal. Universitat de Barcelona.

esclarecer, el significado físico del valor máximo y su inter-relación con el resto de los parámetros utilizados.

Primero, estudiaremos la influencia que tiene un mismo valor de intensidad del potencial de LJ para las tres fracciones volumétricas estudiadas.

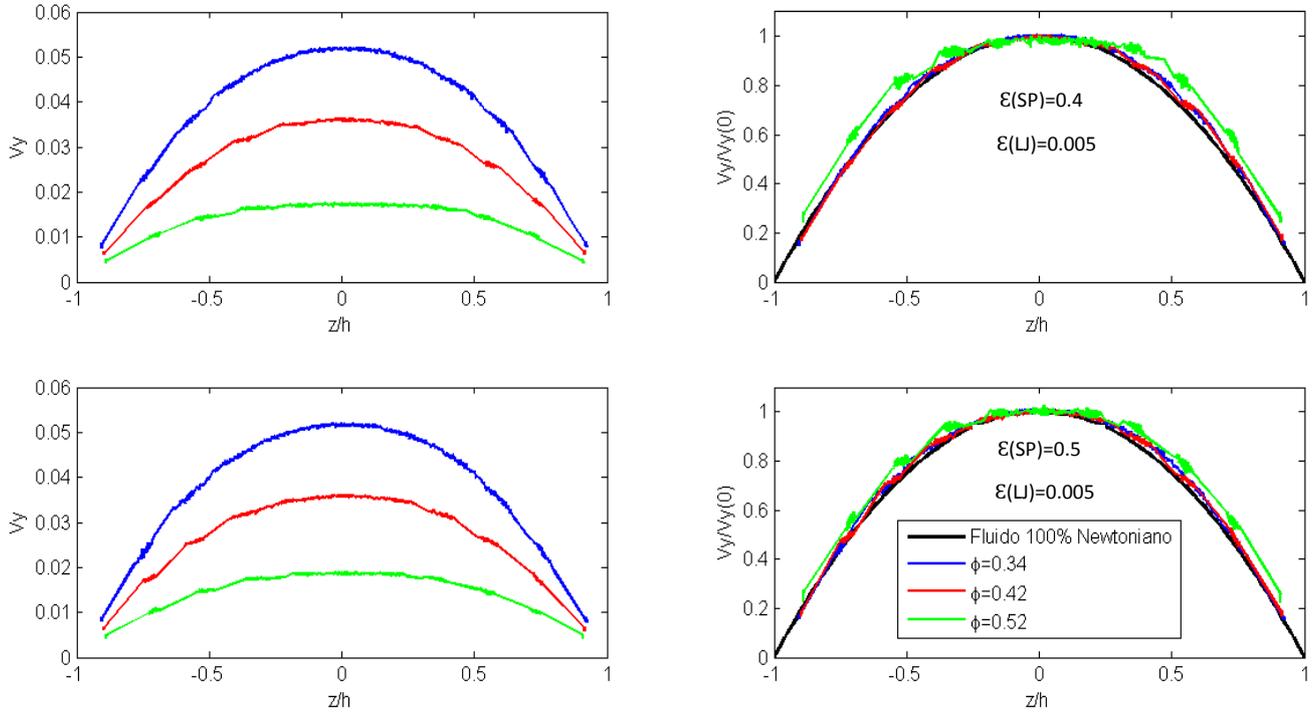


Fig. 12. Perfiles de velocidad [primera columna]; valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro del canal [segunda columna]. Se estudia el efecto del potencial LJ=0.005 para un valor de SP=0.4 (arriba) y SP=0.5 (abajo). $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z.

En la figura 12 se puede observar cómo, para una intensidad baja del potencial de LJ, las velocidades de los coloides disminuyen cuanto mayor es la fracción volumétrica. Sin embargo, el perfil de velocidades es muy parecido al caso de un fluido Newtoniano para las tres fracciones volumétricas.

Si comparamos las gráficas correspondientes al SP=0.5 (fig. 12 y fig. 10), primeramente observamos que para un sistema con SP=0.5, $\Phi=0.52$ y ausencia del potencial de *Lennard Jones*, obtenemos un perfil de velocidades que se ha alejado de la respuesta lineal. Por otro lado, en la figura 12 se ilustra el mismo caso pero con un valor pequeño del potencial de *Lennard Jones*, $\epsilon(LJ)=0.005$. Para este último caso, el perfil de velocidades se asemeja más al perfil de un fluido Newtoniano. Estos resultados sugieren que para una suspensión con alta fracción volumétrica, $\Phi=0.52$, y para un valor fijo del potencial SP, una ligera presencia del potencial de LJ puede inducir que la respuesta del sistema se acerque a la esperada para un fluido completamente Newtoniano.

Por otro lado, para el caso de la figura 12, aunque todos los perfiles son en general muy cercanos al perfil Newtoniano ideal, para el caso $\Phi=0.52$, si comparamos los dos valores empleados en $\mathcal{E}(\text{SP})$, la respuesta resulta más no-lineal para el caso $\mathcal{E}(\text{SP})=0.4$ que para $\mathcal{E}(\text{SP})=0.5$, lo cual no resulta intuitivo. Estos resultados son altamente no-triviales y merecen un estudio más detallado.

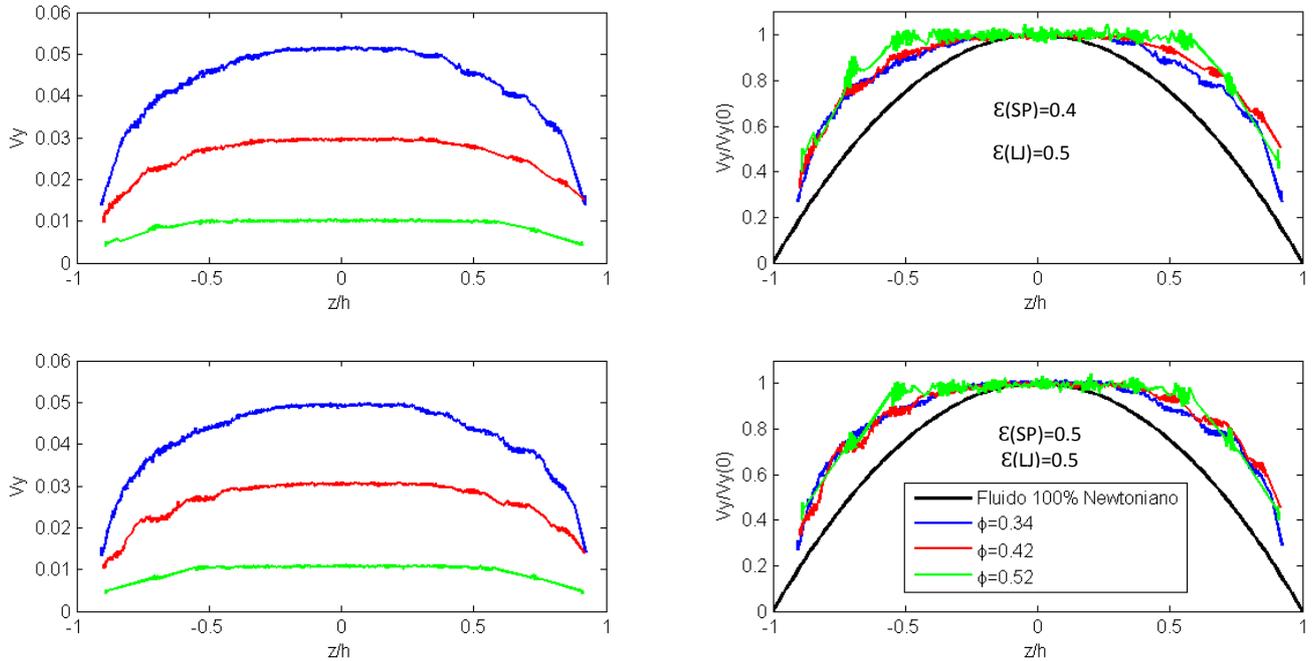


Fig. 13. Perfiles de velocidad [primera columna]; valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro del canal [segunda columna]. Se estudia el efecto del potencial LJ=0.5 para un valor de SP=0.4 (arriba) y SP=0.5 (abajo). $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

Es importante destacar que la aparición de comportamientos anómalos en este tipo de sistemas es típicamente atribuido al nivel de empaquetamiento y al nivel de rugosidad de las paredes. Sin embargo, en la figura 13 se puede apreciar claramente que para un valor mucho mayor de LJ, el perfil se aleja claramente de la linealidad, y que este alejamiento es notablemente mayor cuanto mayor es la fracción volumétrica. En este caso, cabe resaltar que la no-linealidad no ha sido inducida solo por el alto empaquetamiento sino por magnitud de la interacción entre las partículas, lo cual sugiere que las propiedades propias de las partículas también pueden inducir un comportamiento no trivial del flujo.

A continuación estudiamos con más detalle la influencia del potencial LJ para tres fracciones volumétricas. Como anteriormente hemos observado que el valor del SP no tiene una influencia relevante en el perfil de velocidades, hemos escogido un valor fijo de SP=0.5.

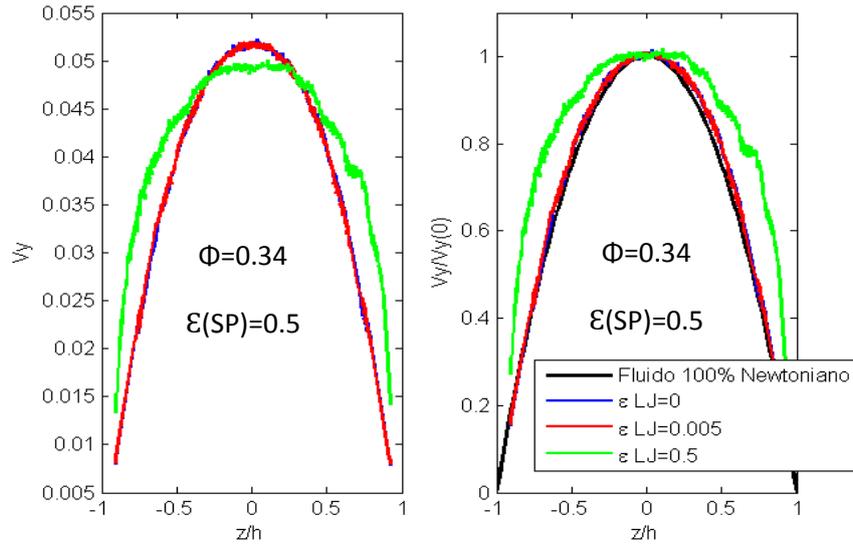


Fig. 14. Perfiles de velocidad [primera columna]; valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro del canal [segunda columna]. Efecto del potencial LJ para $\Phi=0.34$. $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

Para las suspensiones más diluidas, como podemos ver en la figura 14, el perfil de velocidades se aleja de la linealidad sólo cuando el potencial LJ es alto, lo cual es un resultado esperado, dado que el potencial de LJ decae a cero para distancias mayores que $2.5D$.

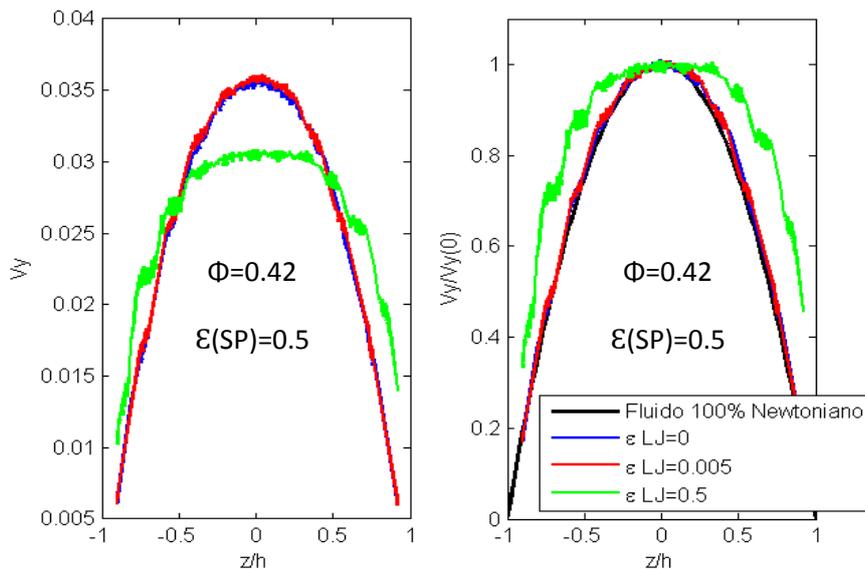


Fig. 15. Perfiles de velocidad [primera columna]; valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro del canal [segunda columna]. Efecto del potencial LJ para $\Phi=0.42$. $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

Para el caso de $\Phi=0.42$ ocurre algo parecido que para la suspensión más diluida, aunque el resultado de introducir el potencial de largo alcance comienza a ser mucho más apreciable. Consideramos importante mencionar que en este caso las curvas no resultaron totalmente simétricas. Asumimos que esto es debido a que en el instante inicial había más partículas cerca de una pared que de la otra, formando un conglomerado de partículas. Esta conclusión es muy preliminar.

Por otro lado, si exploramos los datos en detalle, se puede apreciar que al incrementar el valor del potencial LJ, ($\epsilon=0.005$), la velocidad en el centro del canal aumenta de forma muy ligera. Veamos si esta tendencia es más evidente para el caso más denso, ya que como hemos podido ver en la figura 12, un pequeño valor del potencial LJ no ha desviado el comportamiento del fluido del caso Newtoniano.

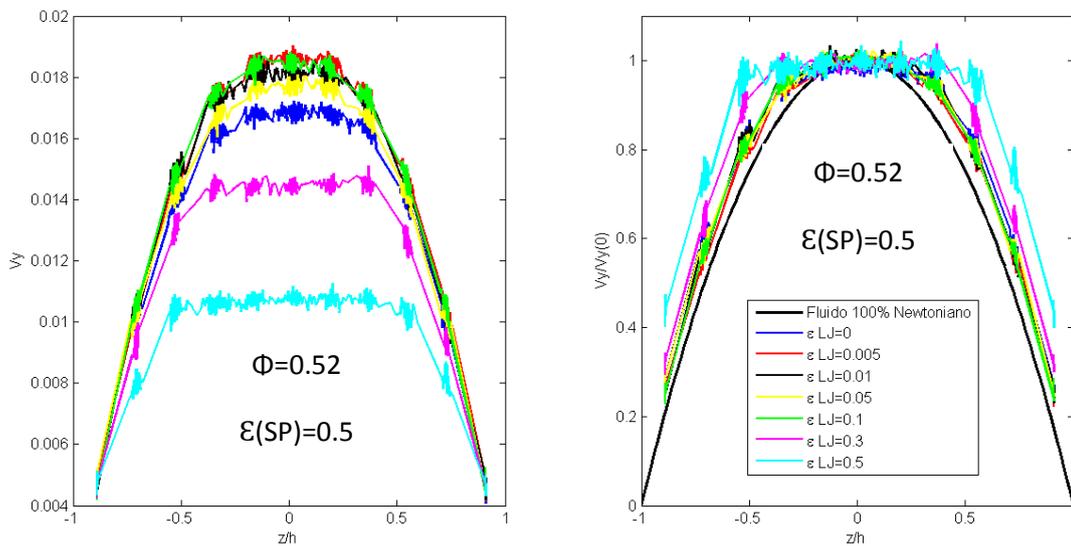


Fig. 16. Perfiles de velocidad [primera columna]; valores de velocidad escalados con la velocidad en el centro del canal [segunda columna]. Efecto del potencial LJ para $\Phi=0.52$. $h=H/2$, donde H es el ancho del canal en el eje Z .

En un principio, para $\Phi=0.52$, habíamos analizado los mismos valores del potencial LJ que para los casos de $\Phi=0.34$ y $\Phi=0.42$. Sin embargo, hubo un aspecto que nos llamó la atención: la velocidad en el centro del canal aumentaba para $\epsilon(LJ)=0.005$, y después disminuía considerablemente para $\epsilon(LJ)=0.5$. Para poder caracterizar mejor esta variación de la velocidad en el centro del canal en función del potencial LJ, decidimos estudiar sistemáticamente el comportamiento para $\Phi=0.52$ (ver figura 16). Es notable que los perfiles de velocidad muestran un comportamiento no trivial a medida que se aumenta la intensidad del potencial de LJ. Un aumento de la intensidad del potencial LJ induce un cambio radical en la reología del sistema. Por su parte, la figura 17 ilustra los resultados de la velocidad en el centro del canal en función de la intensidad del

potencial LJ. Se puede notar como inicialmente un pequeño aumento de la intensidad de potencial LJ, produce una respuesta menos viscosa (*shear thinning*), es decir, la velocidad en el centro del canal es mayor que en el caso que no estuviera presente el potencial LJ. Este comportamiento se mantiene hasta el valor de $\epsilon(LJ)=0.1$ donde el valor de velocidad máxima comienza disminuir notablemente a medida que la interacción a largo alcance aumenta su intensidad.

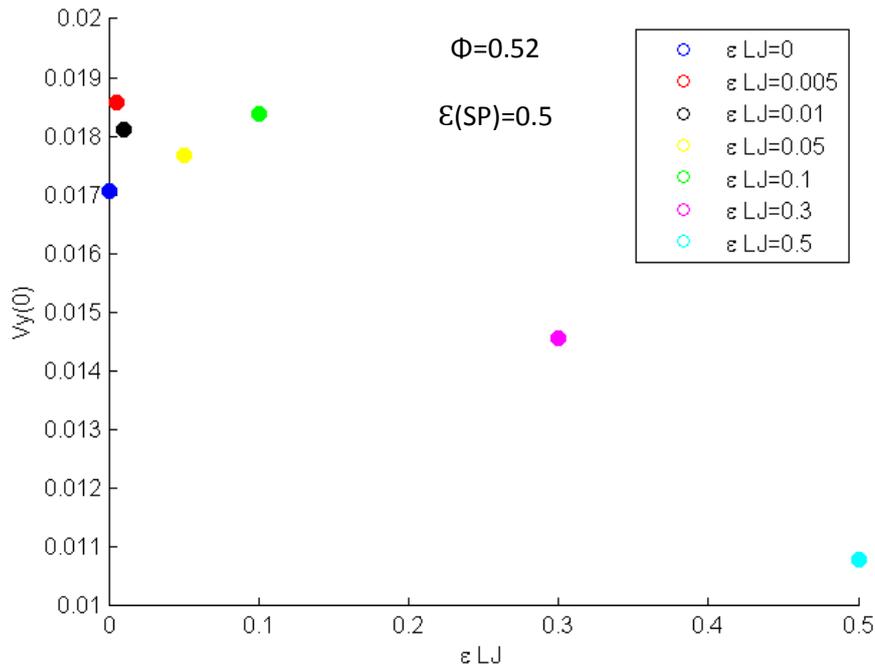


Fig. 17. Influencia del potencial LJ en la velocidad del centro del canal para suspensiones con $\Phi=0.52$.

4.3. Grado de orden del sistema

En el pasado se ha estudiado experimentalmente cómo eventos de reordenamiento local pueden entorpecer y en ocasiones determinar la naturaleza del flujo de fluidos complejos. Es por ello que hemos estudiado grado de orden espacial que adquiere el sistema en estado estacionario, en función de la fracción volumétrica y la intensidad del potencial LJ. También hemos querido observar si este orden es diferente en el centro del canal y cerca de las paredes.

Para estudiar este ordenamiento global del sistema, se ha hecho uso de la función de correlación radial $g(r)$. Esta función es una medida de la probabilidad de encontrar una

partícula a una distancia r desde una partícula de referencia dada y nos permite dilucidar el tipo de orden espacial que existe en los sistemas de partículas.

En primer lugar, vamos a observar la función de distribución radial volumétrica para el caso más diluido y el más denso en el estado estacionario, en función del potencial LJ. Es importante resaltar que la $g(r)$ volumétrica no es 100% fiable para el escenario que estamos estudiando porque nuestro sistema no es isótropo en las tres direcciones. De hecho, tenemos una anisotropía generada por la presencia de las paredes y otra por la direccionalidad del gradiente de presiones. Sin embargo, la $g(r)$ nos aporta una idea aproximada del orden del sistema. Todas las gráficas corresponden a un valor del potencial $SP=0.5$.

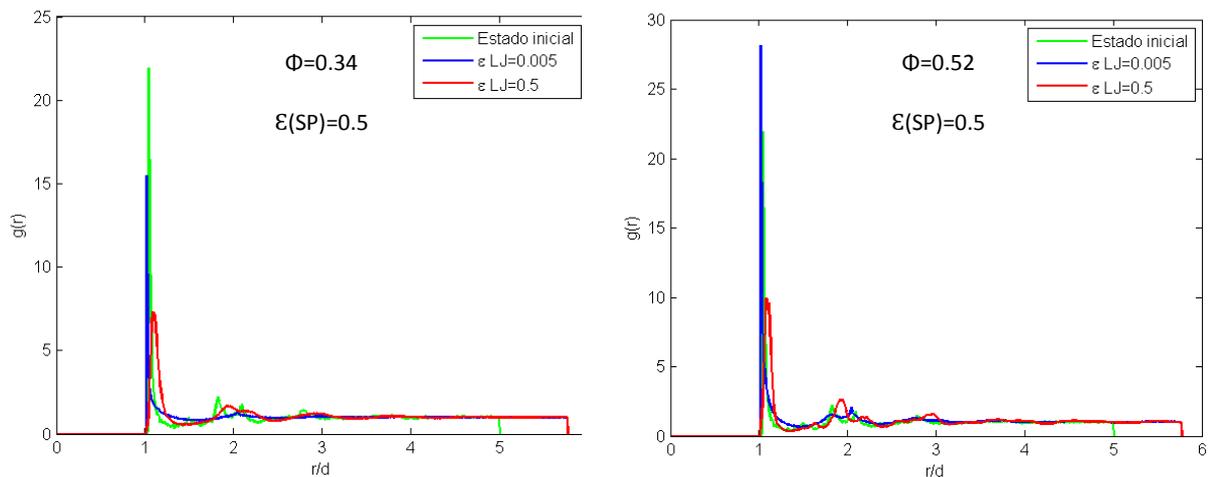


Fig. 18. $g(r)$ volumétrica en el estado estacionario para $\Phi=0.34$ y $\Phi=0.52$. r =distancia entre partículas, d =diámetro de las partículas.

En la figura 18 se muestra que la función de distribución radial presenta picos bien definidos a distancias definidas por números enteros de diámetros. Estos resultados sugieren la existencia de un ligero orden espacial (tipo cúbico simple) en el estado estacionario para ambas fracciones de volumen y valores del potencial LJ; tal y como cabría esperarse el orden espacial está mejor definido para el caso más denso.

Hemos considerado interesante estudiar el orden de los coloides en el centro del canal y cerca de las paredes para el caso más denso. Esta vez la $g(r)$ obtenida sí que sería suficientemente efectiva ya que los planos en los que está siendo calculada (plano XY) son completamente isótropos.

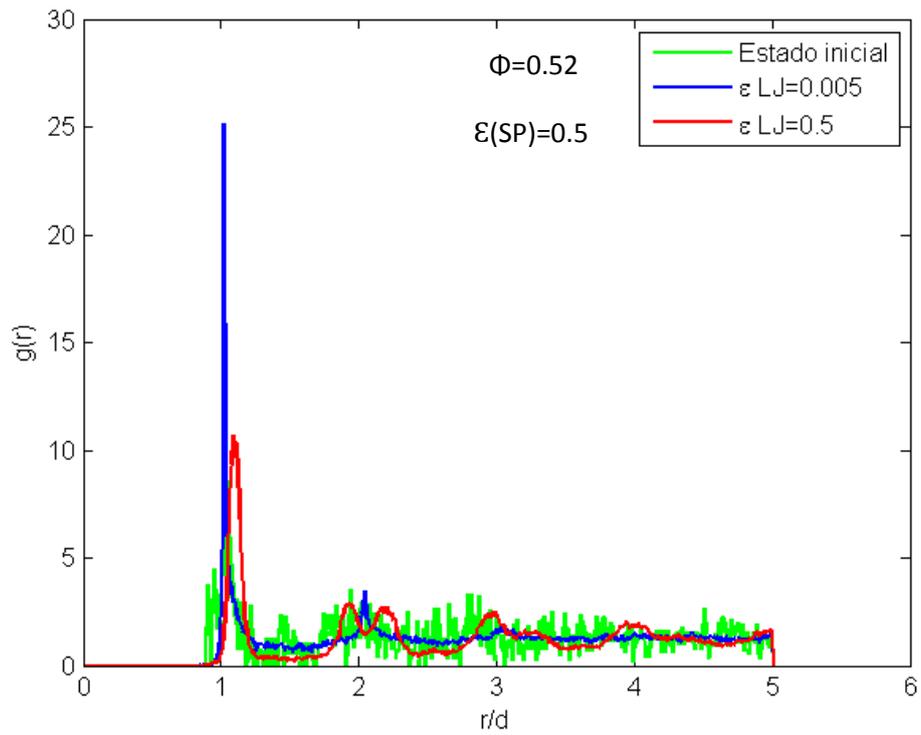


Fig. 19. $g(r)$ bidimensional en el centro del canal para $\Phi=0.52$. r =distancia entre partículas, d =diámetro de las partículas.

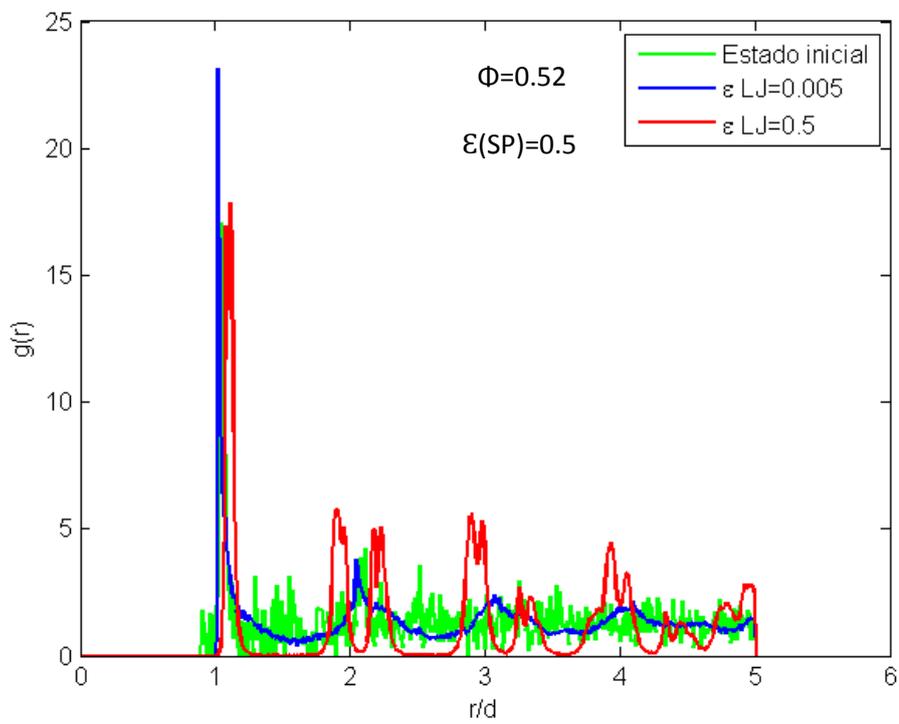


Fig. 20. $g(r)$ cerca de la pared del canal para $\Phi=0.52$. r =distancia entre partículas, d =diámetro de las partículas.

En el caso de la $g(r)$ bidimensional, se puede apreciar mejor el orden del sistema. Para el caso más débil del potencial de LJ, $\epsilon(LJ)=0.005$, se pueden observar claramente picos en un número entero de veces el diámetro de los coloides, lo que indica que la estructura se asemeja a una cúbica simple. También podemos ver cómo estos picos son mayores cerca de la pared.

Para un potencial más intenso de LJ, la estructura se asemeja más a una hexagonal compacta, mostrando picos en valores enteros de $\sqrt{3}D$. Además, también podemos observar picos en un número entero de veces el diámetro del coloide, pero estos picos están ligeramente desplazados hacia valores superiores por la interacción repulsiva del potencial de LJ a distancias cortas.

5. Conclusiones

En el presente trabajo hemos realizado un estudio sistemático del flujo de un fluido complejo a través de un canal rectangular. Así, estudiamos el comportamiento de este sistema utilizando diferentes potenciales de interacción entre los coloides y grado de empaquetamiento.

Para el caso de sistemas coloidales con interacción de tipo *Soft Potential* obtuvimos por lo general respuestas lineales, las cuales solo fueron alteradas en sistemas con altos valores de fracción volumétrica.

Para el caso de sistemas con interacción a largo alcance, hemos observado cómo la intensidad del potencial de *Lennard Jones*, junto con una fracción volumétrica alta, induce una no-linealidad muy notable en los perfiles de velocidad. Además, un ligero valor de $\epsilon(LJ)$ resulta en un aumento de la velocidad en el centro del canal, pero una vez superado el umbral aproximado de $\epsilon(LJ) = 0.1$, la velocidad empieza a disminuir conforme aumenta la intensidad de $\epsilon(LJ)$. En este caso cabe resaltar que la no-linealidad ha sido inducida no solo por el alto empaquetamiento sino también por la magnitud de la interacción entre las partículas, lo cual sugiere que las propiedades propias de las partículas también pueden inducir un comportamiento no trivial del flujo.

El sistema muestra un orden espacial que se asemeja a la cúbica simple para intensidades bajas del potencial de *Lennard Jones* (alrededor de 0.005), mientras que para intensidades mayores el orden se asemeja más a una hexagonal compacta. Nuestros resultados indican que el orden espacial es más definido cerca de las paredes que en el centro del canal.

6. Líneas futuras

El presente proyecto ha caracterizado el flujo de suspensiones coloidales densas a través de dos paredes paralelas a través del código Ludwig, basado en el método de Lattice-Boltzmann. Se ha estudiado la influencia de la fracción volumétrica y la intensidad de los potenciales existentes entre las partículas en el perfil de velocidades coloidal.

En primer lugar, este trabajo ha estudiado la linealidad o no-linealidad del perfil de velocidades. En un futuro se podría obtener el estrés del sistema para poder así obtener la ecuación constitutiva que caracteriza el fluido, así como estudiar la influencia de más valores de $\epsilon(LJ)$ en la velocidad en el centro del canal.

Por otro lado, sería interesante estudiar la influencia del gradiente de presión del líquido en el comportamiento de la velocidad de los coloides para poder averiguar, por ejemplo, si un aumento de la velocidad convectiva de las partículas puede inducir un atasco.

Además, el presente informe ha presentado una configuración caracterizada por dos paredes paralelas, pero también se podría estudiar la influencia de la geometría del sistema en el flujo. Sería interesante simular, por ejemplo, la presencia de paredes inclinadas, haciendo que la superficie de salida del canal fuera más estrecha que la superficie de entrada.

7. Bibliografía

- [1] L. Isa, “*Capillary flow of dense colloidal suspensions*”, (2007)
- [2] M. E. Staben, R. H. Davis, “*Particle transport in Poiseuille flow in narrow channels*”, (2004)
- [3] J. Goyon, A. Colin, G. Ovarlez, A. Ajdari, L. Bocquet, “*Spatial cooperativity in soft glassy flows*”, (2008)
- [4] H. Başağaoğlu, P. Meakin, S. Succi, G. R. Redden, T. R. Ginn, “*Two-dimensional lattice Boltzmann simulation of colloid migration in rough-walled narrow flow channels*”, (2008)
- [5] V. N. Michailidou, G. Petekidis, J. W. Swan, J. F. Brady, “*Dynamics of concentrated hard-sphere colloids near a wall*”, (2009)
- [6] K. V. Edmond, C. R. Nugent, E. R. Weeks, “*Influence of confinement on dynamical heterogeneities in dense colloidal samples*”, (2012)
- [7] A. Nikoubashman, C. N. Likos, G. Kahl, “*Computer simulations of colloidal particles under flow in microfluidic channels*”, (2012)
- [8] H. Başağaoğlu, S. Allwein, S. Succi, H. Dixon, J. T. Carrola Jr., S. Stothoff, “*Two- and three- dimensional lattice Boltzmann simulations of particle migration in microchannels*”, (2013)
- [9] A. Nikoubashman, N. A. Mahynski, A. H. Pirayandeh, A. Z. Panagiotopoulos, “*Flow-induced demixing of polymer-colloid mixtures in microfluidic channels*”, (2014)
- [10] S. Chen, G. D. Doolen, “*Lattice Boltzmann method for fluid flows*” (1998)
- [11] S. Kondaraju, H. Farhat, J. S. Lee, “*Study of aggregational characteristics of emulsions on their rheological properties using the lattice Boltzmann approach*”, (2011)
- [12] J.C. Desplat, I. Pagonabarraga, P. Bladon, “*LUDWIG: A parallel Lattice-Boltzmann code for complex fluids*”, (2008)
- [13] L. J. Rodríguez, “*Sistemas coloidales en farmacia*”, (2007)
- [14] M. Skoge, A. Donev, F. H. Stillinger, S. Torquato, “*Packing hard spheres in high dimensional Euclidean spaces*”, (2006)

[15] L. Isa, R. Besseling, W. C. K. Poon, “*Shear Zones and Wall Slip in the Capillary Flow of Concentrated Colloidal Suspensions*”, (2007)

[16] D. Genovese, J. Sprakel, “*Crystallization and intermittent dynamics in constricted microfluidic flows of dense suspensions*”, (2011)

[17] I. Pagonabarraga, F. Alarcón, Departament de Física Fonamental de la Universitat de Barcelona (Comunicación Personal)

[18]

http://chemwiki.ucdavis.edu/Physical_Chemistry/Physical_Properties_of_Matter/Intermolecular_Forces/Lennard-Jones_Potential