

Escalado consistente de las fluctuaciones térmicas en DPD/SPH

Adolfo Vázquez¹, Marco Ellero¹², Pep Español^{1*}

¹ *Departamento de Física Fundamental, UNED, Apartado 60141, 28080 Madrid, Spain*

² *Lehrstuhl für Aerodynamik, Technische Universität München, 85747 Garching, Germany*

La DPD (Dissipative Particle Dynamics) es un modelo estocástico de partículas fluidas para la simulación de fluidos newtonianos a escalas mesoscópicas. En la DPD, un fluido newtoniano se representa mediante una colección de puntos que sufren interacciones estocásticas que conservan el momento, y que producen un comportamiento hidrodinámico en cierto nivel de coarse graining. La DPD también incluye fluctuaciones térmicas de una manera termodinámicamente consistente.

A pesar de su éxito, la DPD sufre de algunos problemas conceptuales que pueden limitar su uso y aplicabilidad:

1. No permite una elección arbitraria de la ecuación de estado.
2. No hay una conexión directa entre los parámetros del modelo y los coeficientes de transporte del fluido simulado.
3. El tamaño de la partícula fluida no está definido.

En una elaboración posterior, el modelo de la DPD ha sido puesto en relación con la técnica lagrangiana sin red de resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes denominada Smoothed Particle Hydrodynamics o SPH. Este nuevo modelo, denominado SDPD (Smoothed Dissipative Particle Dynamics) es capaz de resolver los problemas mencionados:

1. Permite introducir una ecuación de estado arbitraria, por lo que podremos utilizar, por ejemplo, una ecuación de estado de Van der Waals, o expresiones más generales.

2. En el modelo SDPD, por ser una discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes, no se requiere un cálculo previo de los coeficientes de transporte del fluido simulado, pues son un input del modelo.

3. La definición del volumen de la partícula fluida nos permite saber cuál es su tamaño. Además, los resultados de las simulaciones no dependen de dicho tamaño: el modelo no depende de la escala que estamos simulando.

El nuevo modelo, por lo tanto, muestra la relación entre el DPD y el SPH, obteniendo lo mejor de ambos métodos (fluctuaciones del DPD y conexión con las ecuaciones de Navier-Stokes del SPH) y clarificando la relación entre el concepto de partícula fluida en la DPD y en la SPH.

En el presente trabajo, mostramos cómo las fluctuaciones térmicas escalan apropiadamente con el tamaño de las partículas fluidas. Así, cuanto menor son estas partículas y, por tanto, mejor resolvemos el fluido, mayores son las fluctuaciones térmicas, con una amplitud que escala con la inversa de la raíz cuadrada del volumen de las partículas. A pesar de esto, la amplitud de las fluctuaciones de velocidad de una partícula coloidal no se ve afectada por el grado de resolución del fluido a su alrededor.

* avazquez@bec.uned.es
marco.ellero@aer.mw.tum.de
pep@fisfun.uned.es