

Simulação SPH para dispositivos TSAW e SSAW

Edgar Andrés Patino Narino (CTI) eanarino@cti.gov.br

Resumo

Os sensores de ondas acústicas superficiais (SAW) estão sendo usados em várias aplicações (áreas como biomedicina, nanotecnologia e impressão em 3D de bio-tecidos) com fluidos em fase líquida, com resultados robustos e precisos. Gerando a necessidade de aumentar a sensibilidade de vários sensores e diminuir quantidade de tempo necessário para obter respostas no sensor. Para fazer estes avanços, é imperioso o entendimento dos efeitos de SAW de alta frequência nos microfluidos e as propriedades das cargas vibratórias cíclicas geradas, que envolve a necessidade de simulação fluídica e de Radiofrequência (RF), simultaneamente. Assim, as utilizações de métodos numéricos se apresentam como uma alternativa para o estudo da propagação SAW na interação com fluidos em microdispositivos. Desse modo, o problema principal deste trabalho é desenvolver competências tecnológicas de design, fabricação e testes de circuitos de SAW no CTI, usando métodos de simulação computacional. Programar a metodologia de simulação para o planejamento na fabricação de sensores SAW que interatuam com fluidos, que trabalham na faixa de frequências na ordem de gigahertz e permitam a detecção no nível de partes por milhão, com atuadores e elementos sensíveis feitos com filmes nano-estruturados. Como também, estabelecer um simulador validado através da comparação com resultados analíticos e experimentais. Desse modo, este trabalho descreve o desenvolvimento de um simulador que emprega o método livre de malha de Smoothed Particles Hydrodynamics (SPH) para a modelagem da interação SAW e fluido e seu comportamento no domínio fluídico. O algoritmo como a formulação numérica no simulador apresentam resultados prometedores para ondas em estado móvel e permanente para micro-cavidades.

Palavras-chave: Sensores de ondas acústicas superficiais (SAW); Dispositivos microfluídicos; simulação numérica; SPH.

1. Introdução

Os dispositivos de ondas acústicas superficiais (SAW) estão sendo usados em aplicações relevantes como biomedicina, nanotecnologia e impressão em 3D de biotecdidos. Desse modo, uma necessidade pelo aumento da sensibilidade e um melhor entendimento de vários sensores para a diminuição da quantidade de tempo necessário para gerar resposta nos fluidos torna-se de grande interesse (AGOSTINI; GRECO; CECCHINI, 2018). Para fazer esses avanços, simulações mais precisas para o comportamento de altas frequências junto com a ativação fluídica das cargas mássicas (vibração-inerciais) e refletivas (radiação) tem-se tornado indispensável (SQUIRES; QUAKE, 2005).

Nos fenómenos envolvidos com ondas acústicas para operação de sistemas microfluídicos, a capacidade de compressibilidade dos fluidos é um recurso essencial para descrever corretamente a dinâmica do sistema (BRUUS, 2012), isto ao ser um parâmetro relaciona aos campos de pressão e velocidade das partículas. Assim, quando o meio líquido experimenta uma pequena perturbação, as ondas acústicas propagam-se possuindo um movimento rápido (movimento corporal rígido = fluxo) e/ou oscilação rápida (vibrações) (SQUIRES; QUAKE,

2005). Portanto, na operação de sistemas líquidos se baseia no uso de efeitos físicos produzidos pela propagação de ondas sonoras em um ambiente microescalar; Especialmente em casos com dimensões de micrômetros e interação com ondas acústicas de alta frequência, como alguns dispositivos microfluídicos ou laboratório-em-chip (LOC) na interação com sensores SAW (BRUUS, 2012; SQUIRES; QUAKE, 2005).

Isso acontece porque os transdutores interdigitais geralmente acoplados aos LOC apresentam um sinal de frequência de rádio típico de 100 MHz. Portanto, para casos com interação com fluidos na fase líquida (por exemplo, a água tem uma velocidade de propagação do som 1435 m/s a 20 °C), um comprimento de onda em torno de 10 μ m pode ser alcançado. Além disso, os dispositivos LOC para aplicações de fluidos geralmente são projetados usando litografia com uma resolução (dimensão mínima) da ordem de vários micrômetros a várias centenas de micrômetros. Como resultado, as amplitudes características de deslocamento são assumidas no regime nanométrico, onde as ondas de propagação irradiada são restritas a uma fina camada de vários comprimentos de onda no microcanal. De fato, essa aplicação de condição de compressibilidade na propagação de ondas representa um dos poucos fenômenos inerciais que podem desempenhar um papel importante na operação dos dispositivos LOC para manipulação de partículas (SQUIRES; QUAKE, 2005).

1.1 Simulação de dispositivos microfluídicos ativados por SAW

A origem da propagação das ondas acústicas se deve principalmente a duas propriedades hidrodinâmicas completamente negligenciadas nos procedimentos tradicionais a serem resolvidos numericamente e analiticamente na mecânica dos fluidos (BRUUS, 2012). Estes são o tratamento da não linearidade da equação de Navier-Stokes e a suposição de uma compressibilidade de fluidos pequena, mas não nula, para a fase líquida (BRUUS, 2012). A onda acústica no micro-escala requer de técnicas de análise mecânica dos fluidos para responder a questões até elementares, tornando o estudo da interação SAW-fluido complexa.

Os métodos lagrangianos sem malha se vêm destacando ao permitir integrar as características multiescala e multi-física em problemas com microfluídica e propagação de onda, tais como: fluxos multifásicos, propagação de ondas acústicas, e interação fluido e estrutura (PATINO-NARINO *et al.*, 2019; PATIÑO-NARIÑO *et al.*, 2019; ZHANG *et al.*, 2016).

1.2 Campos acústicos em micro-canais fluídicos

Em dispositivos microfluídicos acionados por SAW (SAW-fluidos), os campos acústicos são geralmente classificados como sendo de natureza permanente (SSAW – Standing SAW) (REN *et al.*, 2018) ou movél (TSAW - Travelling SAW) (FAKHFOURI *et al.*, 2018).

Campos acústicos SSAW: Os campos acústicos SSAW são gerados quando dois SAWs de propagação de contador interferem, resultando na formação de posições nodais e anti-nodais com média de tempo no campo sonoro (fluido). Em SSAW, as forças de radiação de campo coletam partículas suspensas nas posições nodais ou antinodais com base em seu contraste acústico com o fluido hospedeiro. Embora os campos tenham sido estabelecidos com SAW de contra-propagação de frequências diferentes para locais ajustáveis e atuação pulsada para padronização espaçadamente seletiva, normalmente o campo permanente é estabelecido em toda a área do canal usando ondas de contra-propagação com correspondência de frequência, resultando em padronização periódica (REN *et al.*, 2018). O mecanismo dominante (padronização ou streaming) tem uma dependência do tamanho de partícula que varia localmente ao longo da largura do canal devido à atenuação SAW inerente.

Campos acústicos TSAW: Em um sistema TSAW, o SAW se propaga em uma direção, assim como a onda que é acoplada do TSAW ao fluido. Como tal, é amplamente assumido que as

forças de radiação resultantes atuam para empurrar continuamente as partículas para longe da fonte acústica. Embora este mecanismo mono-direcional tenha sido usado com sucesso para a classificação de partículas, não é a única forma de comportamento resultante do TSAW. Além disso, por meio de estudos numéricos e experimentais, a padronização periódica foi demonstrada, anteriormente ligada apenas ao SSAW (FAKHFOURI *et al.*, 2018). A padronização de partículas em locais estáveis resulta dos efeitos de difração conforme o TSAW se acopla ao volume do fluido e é afetado pela borda do canal, que atua como uma descontinuidade.

Recentemente, para campos SSAW e TSAW foi observada uma característica de fluxo complexa, a qual afeta o comportamento das partículas nas regiões localizadas ao longo das bordas dos canais onde entra a onda superficial; nesta região, a propagação do som é fraca, prevalecendo fortes fluxos de transmissão (REN *et al.*, 2018). Sendo assim, o objetivo deste trabalho será desenvolver a base numérica e a formulação do método sem malha de SPH para o uso de um simulador para problemas envolvendo fluido-SAW para o projeto de sistemas estruturais em interação com fluidos em micro-canais fluídicos para os estudos dos campos SSAW e TSAW.

2. Metodologia

O processamento do método SPH para a interação SAW-fluido, foi programado para ser executado em uma GPU para o compute do método SPH, usando CUDA/C++. Onde a CPU é usada na inicialização das condições de pré-processamento e na impressão dos dados de pós-processamento. Pela natureza deste estudo é importante reformular o método SPH para as condições propagação de onda acustica em fluidos (PATINO-NARINO *et al.*, 2019). A evolução da densidade é formulada como:

$$\left\langle \frac{d\rho}{dt} \right\rangle_i = \rho_i \sum_{j=1}^N V_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla W_{ij}, \quad (1)$$

Onde ρ_i é a densidade da partícula i e V_j é o volume da partícula j . Além disso, a constantemente reinicialização de volume foi usada como:

$$\langle \rho \rangle_i = m_i \sum_{j=1}^N W_{ij} = \frac{m_i}{V_i}; V_i = \frac{1}{\sum_{j=1}^N W_{ij}} \quad (2)$$

Onde m_i denota a massa. O termo de pressão na equação de momento é aproximado como:

$$-\left\langle \frac{1}{\rho} \nabla P \right\rangle_i = -\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N (\tilde{P}_{ij} + P_b) \tilde{V}_{ij} \nabla_i W_{ij}, \quad (3)$$

e a força viscosa no fluxo de fluidos incompressíveis é formulada como:

$$\left\langle \mathbf{F}^{(\nu)} \right\rangle_i = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N 2\tilde{\mu}_{ij} \tilde{V}_{ij} \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)}{r_{ij}^2 + \varepsilon^2} \nabla_i W_{ij}, \quad (4)$$

Onde $r_{ij} = r_i - r_j$, $\tilde{V}_{ij} = V_i^2 + V_j^2$, $\varepsilon = 0.01h$, $\tilde{P}_{ij} = (P_i \rho_j + P_j \rho_i) / (\rho_i + \rho_j)$, $\tilde{\mu}_{ij} = 4(\mu_j \mu_i) / (\mu_j + \mu_i)$ e $P_b = P_0$ (pressão de referência P_0). Assim, a pressão é definida como:

$$P_i = P_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma_p} - 1 \right], \quad (5)$$

Onde ρ_0 é a densidade inicial e $\gamma_p = 7$ é a constante politrópica do fluido para o meio líquido. O parâmetro γ_p produz pequenas variações na densidade de massa que leva a grandes variações na pressão do fluido, o que limita artificialmente a compressibilidade do fluido. Logo, a velocidade do som c_l para fluidos compressível pode ser definida com a raiz quadrada da equação da derivada de estado em relação à densidade de massa para $c_l^2 = P_0 \gamma_p / \rho_0$.

2.1 Condições de fronteira e iniciais

O acoplamento da propagação de SAW, onde o domínio fluido é contido por uma cavidade com quatro paredes, e uma com a condição de fronteira SAW inserida como se fora o substrato na interface entre o fluido e a SAW. Portanto, uma condição de fluido-estrutura para a condição de partícula não deslizante (no-slip) é definida para as paredes (PATIÑO-NARIÑO *et al.*, 2019), junto com as excitações cíclicas no tempo e espaço para descrever a SAW no substrato (Wall 1), como se descreve na Fig. 1. Onde se considera o fluido inicialmente em repouso e sem a influência de forças no corpo. Portanto, a função de velocidade da SAW (v_{SAW}) para a transmissão da onda acústica no acoplamento SAW-fluido (Fig. 1 (a)), imposta na borda inferior (ver Figura 1 (a) e (c)) é definida como:

$$v_{SAW} = 2\pi u_0 f_{SAW} \exp\left(\frac{-r_x}{L_{Att}}\right) \begin{bmatrix} 0.6 \cos\left(-2\pi\left\{\frac{r_x}{\lambda_f} - f_{SAW}t\right\}\right) \\ \sin\left(-2\pi\left\{\frac{r_x}{\lambda_f} - f_{SAW}t\right\}\right) \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Onde r_x é a componente no eixo-x de r no domínio inferior, u_0 é a amplitude (profundidade máxima) da SAW, f_{SAW} frequência SAW, λ_f comprimento de onda no fluido e t é o tempo. Para esta abordagem a propagação da SAW na cavidade tem sua origem no canto direito em direção ao lado esquerda, com a presença de atenuação exponencial (L_{Att}) com se observa na Fig. 1 (c).

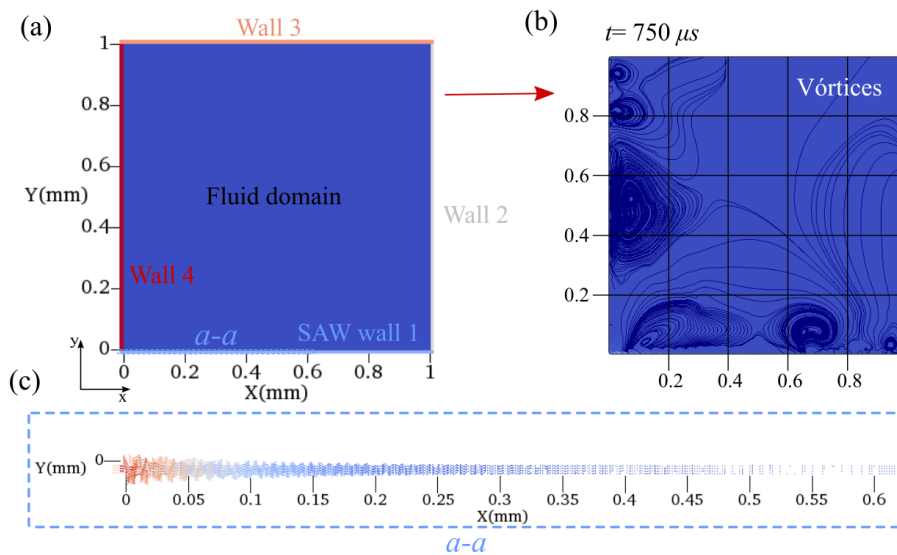


Figura 1 - Configuração cavidade fluídica com condição SAW. (a) Domínio Azul escuro representa o fluido, azul clara parede inferior condição SAW ((SAW wall 1)), assim, as paredes restantes (Wall 2, 3, 4) apresentam cada uma a condição de sólido rígido. (b) Condição de fronteira SAW, mostrando o deslocamento e o decaimento da onda sobre a parede inferior. (c) Descreve a parte de menor decaimento exponencial da profundidade da amplitude da onda SAW.

3. Resultados campos SAW ativados em micro-cavidades fluídicas com SPH

Apresentam-se os resultados das simulações dos campos SAW interagindo com fluido para as configurações SSAW e TSAW. A Figura 1 (b) mostra os vórtices gerados pelo caso TSAW no fluido para uma cavidade de 1x1 mm, mostrando a formação de recirculação gerada pelos vórtices e orbitais na esquina de entrada da onda acústica. Portanto, a Fig. 2 mostra uma cavidade menor de 125x125 μm, onde se observa a formação de dois orbitais circulando simultaneamente, onde as setas indicam a orientação do fluxo ao redor dos vórtices e as cores

às grandezas das velocidades no fluido, mostrando que o fator TSAW no fluido é o principal fator de ativação dos fluxos de transmissão.

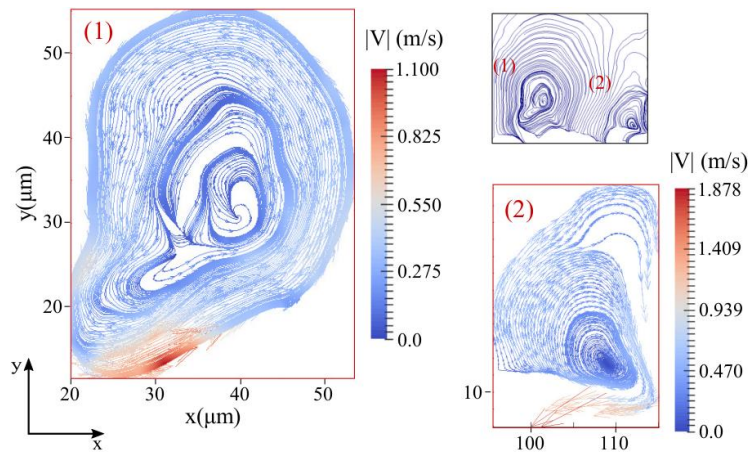


Figura 2 - Simulação TSAW para $t=1000 \mu s$ (10.000 ciclos), apresenta-se a formação de um par de vórtices gerados na cavidade de $125 \times 125 \mu m$. As setas indicam o sentido de fluxo dos vórtices e as cores as grandezas do campo de velocidade, os valores máximos e mínimos são definidos pelas cores vermelho e azul, respetivamente.

A Figura 3 descreve o comportamento para três configurações de cavidades perturbadas pelo campo SSAW, os quais são relacionados pelo comprimento de onda no fluido (λ_f). Observam-se a velocidades e pressão resultante dos mesmos SAW de entrada para diferentes domínios fluidicos, descrevendo adequadamente o comportamento estacionaria do SSAW.

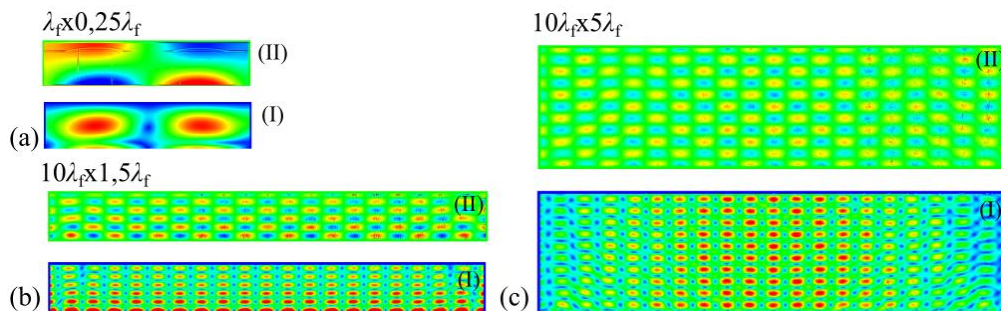


Figura 3 - Simulação de formação SSAW para onda permanente, para diferentes dimensões na cavidade para $\lambda_f=40 \mu m$. As figuras com (I) representam o campo de pressões e (II) representa o campo de velocidades. As cores nas figuras descrevem as grandezas dos campos no fluido, os valores máximos e mínimos são representados pelas cores vermelho e azul, respetivamente.

A Figura 4 mostra o fenómeno de ressalto gerado em cavidades compridas pela interação do SAW e a atenuação fluídica. Este fenómeno é fundamental para o planeamento e a predição de dispositivos de natureza SAW e a manipulação de nano-partículas usando vórtices.

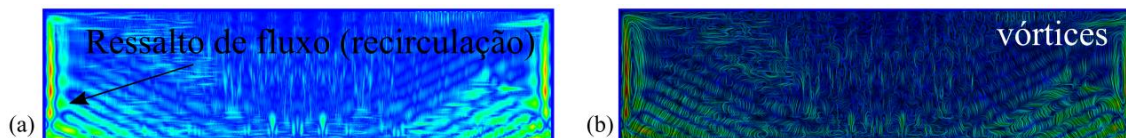


Figura 4 - Simulação de SSAW com presença de ressalto de fluxo nas paredes. (a) Campo de velocidades e (b) linhas de fluxo. As cores nas figuras descrevem as grandezas dos campos de velocidades, onde os valores máximos e mínimos são representados pelas cores vermelho e azul, respetivamente.

4. Conclusões

Foi desenvolvido um simulador para a condição de SAW em interação com fluido viscoso. A modelagem numérica utilizada foi o método livre de malha em formalismo Lagrangiano de SPH. Os casos de estudo realizados foram os modos de propagação de onda em fluidos de

SSAW e TSAW. Para os dois casos se atingiram resultados em conformidade a teoria e o comportamento experimental. Assim, o algoritmo como a formulação das equações de Navier-Stokes propostos neste trabalho, alcançarem resultados prometedores.

A abordagem com SPH consegue gerar no domínio fluídico a presença de vórtices (orbitais com recirculação) e padrões de ondas permanentes (campo de pressão acústica). Resultados essenciais no estudo de manipulação de partículas usando SAW. Uma aproximação versátil para o designe de dispositivos, ao descrever os dois comportamentos, evidenciados na experimentação, mas poucas vezes descrito simultaneamente nas diferentes abordagens teóricas e numéricas.

As formulações numéricas e o algoritmo proposto são o início do estudo para casos monofásicos entre SAW e fluidos, porém, no futuro visa-se a integração para casos multifásicos, para problemas com presença de atomização em gotículas, acrescentando os fenômenos de capilaridade, tensão superficial e superfície livre.

Um dispositivo devera ser projetado e fabricado para o processo de manipulação de nanopartículas, usando como ferramenta de projeto e planejamento o simulador apresentado neste trabalho.

Referências

AGOSTINI, M.; GRECO, G.; CECCHINI, M. *A Rayleigh surface acoustic wave (R-SAW) resonator biosensor based on positive and negative reflectors with sub-nanomolar limit of detection.* Sensors and Actuators B: Chemical, vol. 254, p. 1–7, Jan. 2018.

BRUUS, H. *Acoustofluidics 2: Perturbation theory and ultrasound resonance modes.* Lab Chip, vol. 12, no. 1, p. 20–28, 7 Jan. 2012. .

DEVENDRAN, C.; ALBRECHT, T.; BRENKER, J.; ALAN, T.; NEILD, A. *The importance of travelling wave components in standing surface acoustic wave (SSAW) systems.* Lab on a Chip, vol. 16, no. 19, p. 3756–3766, 2016.

FAKHFOURI, A.; DEVENDRAN, C.; AHMED, A.; SORIA, J.; NEILD, A. *The size dependant behaviour of particles driven by a travelling surface acoustic wave (TSAW).* Lab on a Chip, vol. 18, no. 24, p. 3926–3938, 2018.

PATIÑO-NARIÑO, E. A.; GALVIS, A. F.; SOLLERO, P.; PAVANELLO, R.; MOSHKALEV, S. A. *A consistent multiphase SPH approximation for bubble rising with moderate Reynolds numbers.* Engineering Analysis with Boundary Elements, vol. 105, p. 1–19, 15 Aug. 2019. .

PATINO-NARINO, E. A.; IDAGAWA, H. S.; DE LARA, D. S.; SAVU, R.; MOSHKALEV, S. A.; FERREIRA, L. O. S. *Smoothed particle hydrodynamics simulation: a tool for accurate characterization of microfluidic devices.* Journal of Engineering Mathematics, vol. 115, no. 1, p. 183–205, 11 Apr. 2019.

REN, L.; YANG, S.; ZHANG, P.; QU, Z.; MAO, Z.; HUANG, P. H.; CHEN, Y.; WU, M.; WANG, L.; LI, P.; HUANG, T. J. *Standing Surface Acoustic Wave (SSAW)-Based Fluorescence-Activated Cell Sorter.* Small, vol. 14, no. 40, p. 1–8, 2018.

SQUIRES, T. M.; QUAKE, S. R. *Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale.* Reviews of Modern Physics, vol. 77, no. 3, p. 977–1026, 6 Oct. 2005.

ZHANG, Y. O.; ZHANG, T.; OUYANG, H.; LI, T. Y. *Efficient SPH simulation of time-domain acoustic wave propagation.* Engineering Analysis with Boundary Elements, vol. 62, p. 112–122, 2016.