Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXIX, págs. 467-472 (artículo completo) F.E. Dotti, M. Febbo, S.P. Machado, M. Saravia, M.A. Storti (Eds.) Bahía Blanca, 1-4 Noviembre 2022

SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO A BAJO NÚMERO DE REYNOLDS EN UN MICRORESONADOR DEL TIPO PLACA. PARTE 3: VARIACIONES EN LA GEOMETRIA

NUMERICAL SIMULATION OF THE LOW REYNOLDS NUMBER FLOW AROUND A PLATE-TYPE MICRO-RESONATOR. PART 3: VARIATIONS IN GEOMETRY

Sofía S. Sarraf^a, Ezequiel J. López^a, Gustavo A. Ríos Rodríguez^b, Luciano Garelli^b, Laura Battaglia^{b,c} y Jorge D'Elía^b

^aInstituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue-CONICET, Buenos Aires 1400, 8300 Neuquén, Argentina, (sofia.sarraf, ezequiel.lopez)@fain.uncoma.edu.ar

^bCentro de Investigación en Métodos Computacionales, Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano", colec. RN 168 s/n – Par. El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina, (gusadrr, lbattaglia)@santafe-conicet.gob.ar, (lgarelli, jdelia)@cimec.unl.edu.ar

^cGrupo de Investigación en Métodos Numéricos en Ingeniería (GIMNI), Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Facultad Regional Santa Fe (FRSF) Lavaysse 610, Santa Fe (3000), Argentina

Palabras clave: flujo de Stokes, MEMS, factor de calidad, GBEM, Galerkin-BEM.

Resumen. Se presenta una modelización numérica del flujo tridimensional de un fluido viscoso newtoniano en régimen oscilatorio alrededor de un microresonador de tipo placa utilizado en sistemas microelectromecánicos (MEMS). El microresonador consiste en una placa de oro con una alta relación de aspecto, de muy bajo espesor, perforada con 18×4 orificios cuadrados equiespaciados. La placa está empotrada en ambos extremos y vibrando en su primer modo natural a una frecuencia de 20 kHz por encima de un sustrato fijo. Se calcula el factor de calidad del dispositivo, expresado como el cociente entre la energía total del sistema y aquella que disipa al fluido en un ciclo de oscilación, con Galerkin BEM (*Galerkin Boundary Element Method*).

Keywords: Stokes flow, MEMS, quality factor, GBEM, Galerkin-BEM.

Abstract. We present a numerical modeling of the three-dimensional flow of a Newtonian viscous fluid in oscillatory regime around a plate-type micro-resonator used in microelectromechanical systems (MEMS). The micro-resonator consists of a gold plate with a high aspect ratio, having a very low thickness, and perforated with 18×4 equally spaced square holes. The plate is clamped at its two ends and vibrates above a fixed substrate at its first natural mode with a frequency of 20 kHz. The quality factor of the device is calculated, which is expressed as the ratio between the total energy of the system and the energy dissipated to the fluid in an oscillation cycle. The dissipated energy is computed as the work done by the viscous traction on the body surface in an oscillation cycle, performed with GBEM (Galerkin Boundary Element Method).

1. INTRODUCCIÓN

Se considera una modelización numérica del flujo tridimensional (3D) de un fluido viscoso newtoniano en régimen oscilatorio alrededor de un microresonador de tipo placa, de los utilizados en sistemas microelectromecánicos (MEMS, por *microelectromechanical systems*). En particular, el comportamiento dinámico de las placas vibrantes de estos dispositivos teniendo en cuenta el amortiguamiento viscoso. La cinemática de la placa se asumirá conocida, i.e. el esquema numérico no será de interacción fluido-estructura (FSI, por *Fluid Structure Interaction*).

El modelado numérico de los MEMS puede realizarse con diversos métodos numéricos. En particular, con el método de elementos de borde (BEM, por *Boundary Element Method*). El BEM se basa en la formulación de un problema de valores de borde de tipo elíptico, como una ecuación integral de contorno, o ecuación integral de borde (BIE, por *Boundary Integral Equation*), e.g. ver Hackbusch (1995).

En trabajos anteriores (Sarraf et al., 2018b, 2014a) se considera el empleo de BEM en este tipo de problemas, mediante una BIE en velocidades con un operador integral completado, usualmente denotado en la literatura como CIV-BIE (por *Completed Indirect Velocity* BIE), o bien CDL-BIE (por *Completed Double-Layer* BIE) (Power y Wrobel, 1995), e.g. ver también los textos de Kim y Karrila (1991); Pozrikidis (1992). En cualquier caso, la CIV-BIE es una ecuación integral de tipo indirecta y de segunda clase, donde utiliza simultáneamente ciertas densidades superficiales de doble y simple capa, mientras que su término fuente está determinado a partir de la velocidad del flujo no-perturbado. La solución numérica de la CIV-BIE puede hacerse, en particular, mediante una técnica de colocación al centroide de los elementos, o bien con una ponderación de Galerkin (GBEM, por Galerkin BEM), e.g. ver Sarraf et al. (2014b); D'Elía et al. (2011); D'Elía et al. (2014); Sarraf et al. (2018a).

A diferencia de trabajos anteriores, en este trabajo se elige un caso donde la geometría es un poco más exigente, i.e. placas rectangulares metálicas con $M \times N$ perforaciones cuadradas, en vez de circulares, y que cuenta con validaciones experimentales de literatura algo más exhaustivas, en base a los experimentos de De Pasquale et al. (2010).

2. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

Se trata el caso de placas de oro rectangulares con perforaciones cuadradas que fueron utilizadas en los experimentos de De Pasquale et al. (2010), donde las placas las excitaron electrostáticamente de modo tal que vibraran en su modo fundamental, midiendo ópticamente las amplitudes de vibración, mientras que el factor de calidad Q lo extrajeron utilizando el método de la potencia media.

En dichos experimentos se rotularon las diversas muestras experimentales con un índice topológico I_T . En particular seleccionamos el caso $I_T = 29$, cuyas dimensiones nominales a y b, la longitud s_0 de los lados de las perforaciones cuadradas, y esquema de orificios $M \times N$ son dados en la Tabla 1. Dicha Tabla incluye además la frecuencia de resonancia f y el factor de calidad Q, siguiendo la nomenclatura de De Pasquale et al. (2010), mientras que las propiedades del material están dadas en la Tabla 2. En el sistema de coordenadas adoptado el eje x es paralelo al lado de mayor dimensión de la placa, mientras que el eje z es perpendicular al sustrato.

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA

En el presente caso, asimilado a un flujo exterior a un cuerpo cerrado e inmerso en una corriente que se extiende en un dominio no acotado, resulta aplicable la BIE de Power-Miranda-

| Propiedad | Valor |
|---|------------------------------|
| longitud nominal de la placa | $a = 376 \mu \mathrm{m}$ |
| ancho nominal de la placa | $b = 99 \mu \mathrm{m}$ |
| espesor (medido) de la placa | $h_c = 6.298 \mu \mathrm{m}$ |
| lado de los orificios (cuadrados) | $s_0 = 7.20 \mu m$ |
| esquema de orificios $M \times N$ | 18×4 (cuadrados) |
| frecuencia de resonancia | f = 20.25 Hz |
| factor de calidad $Q_{\text{DePasquale, }I_T=29}$ para $I_T=29$ | Q = 17.95 |

Tabla 1: Datos geométricos de la placa, esquema de orificios, frecuencia de resonancia f, y factor de calidad $Q_{\text{DePasquale}, I_T=29}$ para el índice topológico I_T indicado, según De Pasquale et al. (2010).

| Propiedad | Valor |
|--------------------------------|---|
| módulo de Young de la placa | $Y = 1.5 \times 10^{14}\mathrm{\mu g}/(\mathrm{s\mu m})$ |
| densidad de la placa | $ ho_p = 19.32 	imes 10^{-6} \mu { m g} / \mu { m m}^3$ |
| densidad del fluido (aire) | $ ho_f = 1.1786 	imes 10^{-9} \mu { m g} / \mu { m m}^3$ |
| viscosidad dinámica del fluido | $\mu = 1.86 	imes 10^{-2} \mathrm{\mu g}/(\mathrm{s} \mathrm{\mu m})$ |

Tabla 2: Propiedades físicas de la placa (oro) y del fluido (aire).

Hebeker (PMH, Pozrikidis (1992)). En este método, la geometría del dominio se la aproxima mediante una malla finita de elementos colocados únicamente en las superficies del cuerpo (placa y sustrato), en particular, con triángulos planos. Dos variantes clásicas dentro de BEM son: (i) una técnica de colocación en los centroides de los elementos, y (ii) una ponderación de Galerkin en los nodos de los elementos (Sarraf et al., 2014b; D'Elía et al., 2011; D'Elía et al., 2014; Sarraf et al., 2018a). En el presente trabajo solo se emplea BEM mediante ponderación de Galerkin (Galerkin BEM, o GBEM (Sutradhar et al., 2008)), mientras que BEM con colocación no será utilizado debido a un costo computacional relativamente elevado en recursos de hardware, como queda en evidencia la Tabla 4 del ejemplo numérico.

3.1. Condición de borde en BEM

En un BEM con geometría fija, la condición de borde es la velocidad impuesta en los nodos y que surge de la derivada en el tiempo del desplazamiento del modo impuesto. En el caso del primer modo de vibración de la placa perforada, la velocidad impuesta es la derivada en el tiempo del desplazamiento modal, mostrado en la Fig. 1.

3.2. Factor de calidad

A continuación repasamos el cálculo del factor de calidad Q en un resonador dado en Sarraf et al. (2018b), factor que se define como

$$Q = 2\pi \frac{E_{\text{total}}}{\Delta E} \tag{1}$$

donde E_{total} es la energía total ingresada al sistema y ΔE la energía disipada por ciclo de oscilación debida al trabajo de los esfuerzos viscosos sobre la placa. La E_{total} corresponde al contenido de energía inicialmente entregado a la placa, la cual se puede calcular con

$$E_{\text{total}} = K_{p,\text{máx}} = \int_{V_p} \frac{1}{2} \rho_p \mathbf{u}_{p,\text{máx}} \cdot \mathbf{u}_{p,\text{máx}} dV$$
(2)



Figura 1: Desplazamiento (virtual) del primer modo que da lugar a la velocidad (impuesta) en el GBEM.

donde $K_{p,\text{máx}}$ es la energía cinética máxima de la placa (cuando t = 0), $\mathbf{u}_{p,\text{máx}}$ la velocidad máxima de la placa, ρ_p es la densidad del material de la placa y V_p su volumen. Dado que el movimiento de la placa se asume sólo en la dirección z, su velocidad está dada por

$$\mathbf{u}_{p}(x,t) = (0,0,Z(x,t)) = (0,0,A\omega Z_{0}(x)\cos(\omega t))$$
(3)

En la expresión anterior A es la amplitud del movimiento, $Z_0(x)$ es el primer modo de deformación de la placa, y ω es la frecuencia angular. Luego, $\mathbf{u}_{p,\text{máx}} = (0, 0, A\omega Z_0(x))$. Reemplazando esta expresión en la Ec. (2) se obtiene

$$E_{\text{total}} = \frac{1}{2} \rho_p A^2 \omega^2 \int_{V_p} [Z_0(x)]^2 dV$$
 (4)

La energía disipada por ciclo se calcula como el negativo del trabajo realizado por la fuerza viscosa sobre la superficie de la placa a lo largo de un ciclo, $-W_{v,ciclo}$,

$$\Delta E = -W_{v,\text{ciclo}} = -\int_{\text{ciclo}} \delta W_v \tag{5}$$

El diferencial de trabajo de la fuerza viscosa se lo calcula como $\delta W_v = \mathbf{f}_v \cdot \mathbf{u}_p dt dS$, donde dS es el diferencial de superficie sobre el cual actúa la fuerza viscosa \mathbf{f}_v . Luego

$$\Delta E = -\int_0^T \int_{S_p} \mathbf{f}_v \cdot \mathbf{u}_p dS dt = -A\omega \int_0^T \left[\int_{S_p} f_v^z Z_0(x) dS \right] \cos(\omega t) dt \tag{6}$$

donde S_p es la superficie de la placa, T el período de oscilación y f_v^z la componente de la fuerza viscosa en la dirección z.

3.3. Ejemplos numéricos

En la Tabla 3 se muestran algunos datos del hardware de los servidores S1 y S2 utilizados, mientras que en la Tabla 4 se resumen las mallas BEM empleadas, sus números de nodos y de elementos, las memorias primarias (RAM, por *Random Access Memory*) requeridas para una solución directa de los sistemas lineales de ecuaciones involucrados en cada caso, sus relaciones con respecto a la RAM de los servidores empleados, servidor y número de *cores* utilizados. Para resolver el Sistema de Ecuaciones Lineales (SEL) se utilizó la rutina ZGESVX, cuando lo permitía la memoria disponible, sino la ZGESV, ambas de LAPACK en ATLAS. La ZGESVX utiliza la factorización LU para calcular la solución de un SEL en variable compleja AX = B, donde A es la matriz del sistema de $n \times n$, mientras que X y B son matrices de $n \times n_b$, donde n_b es el número de términos independientes en el lado derecho del SEL, retornando además cotas de error en la solución, y una estimación del número de condición, para lo cual requiere una matriz auxiliar del mismo tamaño que la del sistema A. En cambio, la ZGESV hace la misma tarea sin dicha matriz auxiliar pero al precio de no retornar cotas de error en la solución, ni una estimación del número de condición. En los experimentos numéricos se utilizó GBEM con un integrador numérico de los coeficientes de la matriz del sistema de ecuaciones que está basado en la cuadratura de Taylor cuádruple pero suplementado con una Transformación Asinh descripta en D'Elía et al. (2017). En dicho integrador se empleó la regla de cuadratura de Gauss-Legendre (GL) con n_{1d} puntos de cuadratura a lo largo de cada coordenada de integración, implicando un total de n_{1d}^4 puntos por cada par de interacción. En particular, se utilizó la regla Q_{22} , en donde el primer subíndice 2 denota el número de puntos de GL en las autointegrales y en la primera capa de elementos vecinos, mientras que el segundo subíndice 2 es el número de puntos de GL presentes en las remanentes capas de elementos. La Tabla 4 además incluye el factor de calidad Q calculado con GBEM mediante la Ec. (1).

| | Modelo | Frecuencia | cores | memoria | memoria | CPU Mark | fecha de |
|------------|---------------------|------------|-------|-------------|-----------|----------|-------------|
| | | [GHz] | | cache [MiB] | RAM [GiB] | | lanzamiento |
| S 1 | AMD Ryzen 7 3700X | 2.2 | 8 | 32 | 64 | 22715 | Q3-2019 |
| S2 | Threadripper 2970WX | 3.0 | 24 | 64 | 128 | 30134 | Q4-2018 |

| malla | número | número | memoria RAM | memoria RAM | servidor | cores | factor de |
|-------|--------|-----------|----------------|--------------------|------------|--------|-----------|
| BEM | de | de | por colocación | por Galerkin nodal | usado | usados | calidad |
| | nodos | elementos | (ilustrativo) | (único empleado) | | | Q |
| 1 | 6600 | 13480 | 49 GiB (0.76) | 12 GiB (0.19) | S 1 | 8 | 11.160 |
| 2 | 11627 | 23534 | 149 GiB (2.33) | 36 GiB (0.57) | S 1 | 8 | 18.004 |
| 3 | 19507 | 39294 | 208 GiB (1.62) | 52 GiB (0.40) | S2 | 6 | 19.744 |

Tabla 4: Mallas BEM empleadas, número de nodos y de elementos, memorias primarias requeridas por ZGESV, sus proporciones a las disponibles, servidor y *cores* utilizados, y factor de calidad Q según Ec. (1).

4. CONCLUSIONES

A diferencia de Xiao y Ye (2011), en donde el método WBEM (por *Wavelet Boundary Element Method*) que emplearon lo validaron mediante un caso analítico en una placa sin agujeros que vibra en voladizo en su primer modo fundamental, pero sin incluir alguna otra verificación independiente, en este trabajo se tiene en cuenta los resultados experimentales y numéricos de De Pasquale et al. (2010) en donde para el caso $I_T = 29$ obtienen un factor de calidad de $Q_{\text{DePasquale}, I_T=29} \approx 17.95$, mientras que con GBEM en la malla 3 más refinada es de $Q_{\text{GBEM}, I_T=29, \text{ malla } 3} \approx 19.744$, que es un +10%. De todos modos, los presentes resultados son provisionales y falta realizar otras verificaciones. Como una posible continuación prevemos una validación numérica independiente a través de otro método numérico tal como FVM (*Finite Volume Method*), e.g. utilizando las alternativas de OpenFOAM[®] o de Code_Saturne, así como también otros casos experimentales con índices topológicos I_T diferentes.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, proyecto PIP 112-201501-00588CO), la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT, proyectos PICT-2018-1607, PICT-2018-2920), Universidad Nacional del Litoral (UNL, proyectos CAI+D 2020-506-201901-00110-LI, CAI+D 2020-506-201901-00140-LI)), Universidad Tecnológica Nacional (UTN, proyecto PID-UTN-8132). y ha sido parcialmente realizado con los recursos del *Free Software Foundation/GNU-Project*, tales como GNU–Linux-OS, GNU–GFortran, GNU–Octave, GNU–Git, GNU–Doxygen, y GNU–GIMP, así como otros recursos de código abierto, tales como LATEX, PGF, TikZ, y PGFPlots.

REFERENCIAS

- De Pasquale G., Veijola T., y Somà A. Modelling and validation of air damping in perforated gold and silicon MEMS plates. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 20(1):015010, 2010. doi:10.1088/0960-1317/20/1/015010.
- D'Elía J., Battaglia L., Cardona A., y Storti M. Full numerical quadrature of weakly singular double surface integrals in Galerkin boundary element methods. *Internationa Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 27(2):314–334, 2011.
- D'Elía J., Battaglia L., Cardona A., Storti M., y Ríos Rodríguez G. Galerkin boundary elements for a computation of the surface tractions in exterior Stokes flows. *J Fluids Eng- Trans ASME*, 136(11):111102–111117, 2014.
- D'Elía J., Sarraf S., López E., Battaglia L., y Ríos Rodríguez G. Integración numérica en ecuaciones integrales de superficie con núcleos débilmente singulares. Transformación de coordenadas asinh. En *Mecánica Computacional, vol. XXXV*. La Plata, 2017.
- Hackbusch W. Integral equations. Birkhäuser, 1995.
- Kim S. y Karrila S.J. *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications*. Butterwoth-Heinemann, 1991.
- Power H. y Wrobel L.C. *Boundary Integral Methods in Fluid Mechanics*. Computational Mechanics Publications, Southampton, UK, 1995.
- Pozrikidis C. Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow. Cambridge University Press, New York, USA, 1992.
- Sarraf S., López E., Battaglia L., Ríos Rodríguez G., y D'Elía J. Amortiguamiento viscoso en un microresonador en flujo reptante simulado con elementos de borde. En *Mecánica Computacional*, volumen XXXIII, páginas 263–272. 2014a.
- Sarraf S., López E., Battaglia L., Ríos Rodríguez G., y D'Elía J. An improved assembling algorithm in boundary elements with Galerkin weighting applied to three-dimensional Stokes flows. *J Fluids Eng- Trans ASME*, 140(1):011401, 2018a. doi:10.1115/1.4037690.
- Sarraf S., López E., Battaglia L., Ríos Rodríguez G., y D'Elía J. Simulación numérica del flujo a bajo número de Reynolds en un microresonador del tipo placa. Parte 1: OpenFOAM y GBEM. En *Mecánica Computacional, vol. XXXVI*. Tucumán, 2018b.
- Sarraf S., López E., Ríos Rodríguez G., y D'Elía J. Validation of a Galerkin technique on a boundary integral equation for creeping flow around a torus. *Comp. Appl. Math.*, 33(1):63–80, 2014b.
- Sutradhar A., Paulino G.H., y Gray L.J. *Symmetric Galerkin Boundary Element Method*. Springer, London, England, 2008.
- Xiao J. y Ye W. Wavelet BEM for large-scale Stokes flows based on the direct integral formulation. *Int. J. for Num. Meth. in Engng.*, 88(7):693–714, 2011.