



TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS

**Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo
de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas**

Andrey Barbosa Guimarães

Brasília, Abril de 2020



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de
Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas

Andrey Barbosa Guimarães

Orientador: Rafael Gabler Gontijo, Dr., UnB

Coorientador: Francisco Ricardo Cunha, Ph.D., UnB

TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS

Brasília, Abril de 2020

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS

**Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo
de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas**

Andrey Barbosa Guimarães

*TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE
BRASÍLIA, COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO
DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS MECÂNICAS.*

Banca Examinadora

Prof. Dr. Rafael Gabler Gontijo
Orientador, ENM-UnB

Prof. Dr. Taygoara Felamingo de Oliveira
Examinador interno, ENM-UnB

Prof. Dr. Paulo César de Moraes
Examinador Externo, IF-UnB

Prof. Dr. Erick de Moraes Franklin
Examinador Externo, Unicamp

FICHA CATALOGRÁFICA

GUIMARÃES, ANDREY BARBOSA

Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas.

[Distrito Federal] 2020.

190p., 210 mm x 297 mm (ENM/FT/UnB, Doutor, Ciências Mecânicas, 2020).

Tese de Doutorado - Universidade de Brasília.

Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Mecânica.

- | | |
|-----------------------|------------------------------|
| 1. Fluidos Magnéticos | 2. Susceptibilidade Complexa |
| 3. Magnetohipertermia | 4. Interações Hidrodinâmicas |
| I. ENM/FT/UnB | II. ENM-DT /2020 |

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

GUIMARÃES, A. B. (2020). Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas. Tese de Doutorado em Ciências Mecânicas, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 190p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Andrey Barbosa Guimarães.

TÍTULO DA TESE DE DOUTORADO: Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas.

GRAU / ANO: Doutor / 2020

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta tese de doutorado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta tese de doutorado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Andrey Barbosa Guimarães
Rua José M. da Silva 380. Jardim São João.
78600-000 Barra do Garças - MT - Brasil.

Agradecimentos

Agradeço a Deus, pelo dom supremo da vida.

À minha amada esposa Juliana e minha carinhosa e amada filha Júlia, que sem elas essa trajetória da minha vida não seria plena.

Aos meus amados pais, João e Neuraci, à minha irmã querida, Christina, que sempre estão presentes, me apoiando de todas as maneiras nas minhas conquistas, aos quais sempre serei grato, e ao meu sobrinho Kléber Júnior e meu cunhado Kléber.

Ao meu sogro Cícero e minha sogra Terezinha, aos meus cunhados e cunhadas, que ao longo desses anos estiveram comigo como minha segunda família.

Ao meu orientador, professor Rafael Gabler Gontijo e meu coorientador professor Francisco Ricardo Cunha, pela oportunidade oferecida a mim, e por todo o conhecimento, força e paciência.

Aos meus familiares, em especial minha avó Georgina, que já não está entre nós, mas que participou fortemente do meu desenvolvimeto, me incentivando com palavras positivas e com sua sabedoria.

Aos professores da banca examinadora, Paulo César de Moraes, Taygoara Felamingo de Oliveira e Erick de Moraes Franklin, pelas sugestões feitas e assim tornaram esse trabalho ainda mais completo.

Aos meus colegas do grupo Vortex, que em vários momentos me ajudaram, trocando experiências e ideias.

À UnB (Universidade de Brasília).

À UFMT (Universidade Federal de Mato Grosso), pela liberação de licença capacitação para realização desse doutorado.

E a todos, que de alguma forma, um pensamento positivo ou uma palavra amiga, alimentaram os meus sonhos e contribuíram para esta grande conquista da minha vida.

RESUMO

Dinâmica de Langevin Aplicada ao Estudo de Magnetohipertermia em Suspensões Magnéticas

Autor: Andrey Barbosa Guimarães

Orientador: Prof. Rafael Gabler Gontijo

Coorientador: Prof. Francisco Ricardo Cunha

Programa de Pós-graduação em Ciências Mecânicas

Brasília, Abril de 2020

Neste trabalho é realizado um estudo computacional, por meio de simulações diretas de partículas usando Dinâmica de Langevin, para examinar propriedades macroscópicas relacionadas à microestrutura de fluidos magnéticos, com o propósito de entender como as interações hidrodinâmicas de longo alcance e dipolares entre partículas magnéticas influenciam o comportamento da susceptibilidade complexa de uma suspensão magnética submetida a um campo magnético oscilatório. Foi considerado nas simulações um domínio com condições de contorno periódicas para calcular adequadamente as interações entre as partículas através da técnica de somas de Ewald, solucionando o problema de divergência devido ao lento decaimento das interações. A parte real χ' da susceptibilidade complexa está relacionada com o armazenamento de energia de campo magnético, enquanto a parte imaginária χ'' com a dissipação de energia e geração de calor. A parte imaginária da susceptibilidade complexa, prevista pelas simulações, é apresentada em termos de frequência angular, interações campo-partículas, interações dipolares, fração volumétrica de partículas e do número de Péclet. Essa propriedade é usada para investigar o processo de magnetohipertermia que é um campo extremamente promissor de tratamento terapêutico de câncer, através da morte de células tumorais por elevação local da temperatura, induzida pelas partículas magnéticas submetidas a um campo magnético oscilatório. Dessa forma, foi estudado a influência das interações hidrodinâmicas e dipolares na taxa média de aumento de temperatura. Os resultados mostram que as interações dipolares induzem as formações não homogêneas de

cadeias e agregados de partículas aumentando a geração de calor por dissipação de energia magnética, enquanto as interações hidrodinâmicas atenuam esse efeito. As simulações da dinâmica de fluidos magnéticos foram realizadas para o modelo de "dipolo fixo", em que o momento magnético de partículas é fixado em relação à própria partícula. Nossos estudos também sugerem que a maneira de combinar e controlar parâmetros físicos em frequência moderada do campo oscilatório aplicado pode melhorar o desempenho de aquecimento da magnetohipertermia. Os resultados numéricos foram comparados com soluções analíticas assintóticas, nas mesmas condições de parâmetros físicos, para um número pequeno de Péclet na ausência de interações hidrodinâmicas mostrando uma excelente concordância.

Palavras-chave: Suspensão Magnética, Fluido Magnético, Susceptibilidade Complexa, Magnetohipertermia, Interação Hidrodinâmica.

ABSTRACT

Langevin Dynamics Applied to the Study of Magnetic Hyperthermia in Magnetic Suspensions

Author: Andrey Barbosa Guimarães

Advisor: Prof. Rafael Gabler Gontijo

Co-advisor: Prof. Francisco Ricardo Cunha

Graduate Program in Mechanical Sciences

Brasília, April 2020

In this work, a computational study is performed through direct particle simulations using Langevin Dynamics, to examine macroscopic properties related to the microstructure of magnetic fluids, to understand how long range hydrodynamic interactions and dipolar interactions between magnetic particles influence the complex susceptibility of a magnetic suspension subjected to an oscillating magnetic field. In the simulations a domain with periodic boundary conditions was considered to calculate the interactions between the particles using the Ewald sums technique, solving the divergence problem because of the slow decay of interactions. The real part of complex susceptibility, denoted by χ' is related to the storage of magnetic field energy, while the imaginary part χ'' is associated with energy dissipation and heat generation. The imaginary part of the complex susceptibility predicted by the simulations is presented in terms of angular frequency, field-particle interactions, dipolar interactions, volume fraction of particles and Péclet number. This property is used to investigate the process of magnetic hyperthermia, being an extremely promising field of therapeutic cancer treatment through tumor cells death by local temperature rise induced by magnetic particles subjected to an oscillating magnetic field. Thus, was studied the influence of hydrodynamic and dipolar interactions on the average rate of temperature increase. The results show that dipolar interactions induce inhomogeneous formations of chains and particle aggregates increasing heat generation by magnetic energy dissipation, while hy-

hydrodynamic interactions attenuate this effect. The magnetic fluid dynamics simulations were performed for the "fixed dipole", in which the magnetic moment of particles is fixed in relation to the particle. Our studies also suggest that the way to combine and control the moderate frequency physical parameters of the applied oscillatory field may improve the heating performance of magnetic hyperthermia. Numerical results were compared with asymptotic analytical solutions under the same physical parameter conditions for a small number of Péclet in the absence of hydrodynamic interactions showing excellent agreement.

Keywords: Magnetic Suspension, Magnetic Fluid, Complex Susceptibility, Magnetic Hyperthermia, Hydrodynamic Interaction.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	FLUIDOS MAGNÉTICOS	1
1.2	APLICAÇÕES DE FLUIDOS MAGNÉTICOS	4
1.3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
1.3.1	MODELAGEM DE FLUIDOS MAGNÉTICOS	7
1.3.2	MAGNETOHIPERTERMIA E SEU DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO	11
1.4	OBJETIVOS	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	CONEXÃO ENTRE A FORMULAÇÃO MACROSCÓPICA E A DINÂMICA MICROESTRUTURAL EM COLÓIDES MAGNÉTICOS	23
2.2	UMA BREVE DISCUSSÃO SOBRE AS FORÇAS DE INTERAÇÃO FLUIDO- PARTÍCULA PARA UMA PARTÍCULA ISOLADA	27
2.3	CARACTERÍSTICAS DO MOVIMENTO BROWNIANO	30
2.4	EQUAÇÃO DIFERENCIAL ESTOCÁSTICA DE LANGEVIN	31
2.5	MODELAGEM DE FORÇAS E TORQUES BROWNIANOS	32
2.6	FORÇAS E TORQUES MAGNÉTICOS	34
2.7	INTERAÇÃO DIPOLAR	36
2.8	DINÂMICA DE LANGEVIN	40
2.9	RELAXAÇÃO MAGNÉTICA	42

2.10	MODELOS DE MAGNETIZAÇÃO DE EQUILÍBRIO	43
2.11	ADIMENSIONALIZAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DOS PARÂMETROS FÍSICOS DO PROBLEMA	49
2.12	INTERAÇÕES MAGNÉTICAS PERIÓDICAS	51
3	INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS	57
3.1	LINEARIDADE DAS EQUAÇÕES DE STOKES.....	57
3.2	A SOLUÇÃO FUNDAMENTAL	60
3.3	TEOREMA RECÍPROCO DE LORENTZ.....	64
3.4	REPRESENTAÇÃO INTEGRAL DO ESCOAMENTO DE STOKES	66
3.5	LEI DE FAXÉN.....	67
3.6	FORMULAÇÃO MOBILIDADE E O TENSOR MOBILIDADE DE ROTNE- PRAGER	69
3.7	MOBILIDADES DE BEENAKKER E INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS PE- RIÓDICAS	71
4	SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA DO FLUIDO MAGNÉTICO	76
4.1	SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA: ABORDAGEM NUMÉRICA	76
4.2	SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA: ABORDAGEM ANALÍTICA	79
4.3	HISTERESE MAGNÉTICA.....	83
5	RESULTADOS NUMÉRICOS - MAGNETIZAÇÃO DE EQUILÍBRIO E SUSCEP- TIBILIDADE COMPLEXA	88
5.1	ESTUDOS DE MODELOS DE MAGNETIZAÇÃO	89
5.2	O COMPORTAMENTO DA SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA DO FLUIDO MAGNÉTICO COM INTERAÇÕES DIPOLARES: RESULTADOS E VALIDA- ÇÃO DO CÓDIGO	93
5.3	A INFLUÊNCIA DAS INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS NO COMPORTA- MENTO DA SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA	104
5.4	RESULTADOS DE SIMULAÇÕES COM INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS E DIPOLARES PARA DIFERENTES NÚMEROS DE PÉCLET	112
5.5	CURVAS DE HISTERESE E DIAGRAMAS DE FASE	123

6	MAGNETOHIPERTERMIA	137
6.1	FORMULAÇÃO PARA TAXA MÉDIA DE AUMENTO DE TEMPERATURA EM MAGNETOHIPERTERMIA	137
6.2	RESULTADOS SOBRE OS EFEITOS HIDRODINÂMICOS E DIPOLARES NO FLUIDO MAGNÉTICO SUBMETIDO A CAMPOS OSCILATÓRIOS PARA APLICAÇÕES NA MAGNETOHIPERTERMIA.....	142
6.3	RESULTADOS PARA TAXA DE AUMENTO DE TEMPERATURA NA MAG- NETOHIPERTERMIA CONSIDERANDO UM NOVO CAMPO MAGNÉTICO.	159
7	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	164
7.1	CONCLUSÕES	164
7.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	168
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	170
	APÊNDICES	183
I	ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	184
I.1	ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES PARA UMA SUS- PENSÃO DE PARTÍCULAS MAGNÉTICAS SEM INTERAÇÕES HIDRODINÂ- MICAS	184
II	CÓDIGO NUMÉRICO PARA ABORDAGEM ANALÍTICA DA SUSCEPTIBILI- DADE COMPLEXA	187
II.1	CÓDIGO NUMÉRICO EM LINGUAGEM FORTRAN PARA O CÔMPUTO DOS RESULTADOS ANALÍTICOS DA SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA	187

LISTA DE FIGURAS

1.1	Partícula magnética com uma camada superficial de surfactantes (Gontijo, 2013).	2
1.2	Ilustração esquemática do princípio de magnetohipertermia (Cole et al., 2011).	12
2.1	Representação esquemática de um volume contínuo δV de uma suspensão magnética, em que \boldsymbol{x} é uma posição fixa no interior do volume material contínuo, no qual em seu entorno é calculado a propriedade média local e \boldsymbol{y} percorre o interior do volume infinitesimal assinalando onde há partículas.	25
2.2	Trajectoria de uma partícula em movimento browniano.	30
2.3	Forças magnéticas devido a aplicação de um campo magnético em um pequeno elemento de substância magnética polarizada (Gontijo, 2013).	35
2.4	Campo magnético em um ponto \mathbf{P} devido a presença de um dipolo magnético (Gontijo, 2013).	37
2.5	Momento de dipolo fixo, característico de partícula com relaxação magnética Browniano (Alegretti, 2017).	43
2.6	Momento de dipolo desacoplado, característico de partícula com relaxação magnética de Néel (Alegretti, 2017).	43

2.7	Fig. (a), cada partícula na suspensão possui momento de dipolo alinhado em uma direção aleatória, devido a ausência de campo magnético externo. Fig. (b), tem-se o alinhamento parcial de partículas magnéticas suspensas na direção do campo magnético aplicado. Resultados obtidos por meio de simulação computacional de muitos corpos utilizando o código SIMS.....	44
2.8	Esfera com área da superfície hachurada entre θ e $\theta + d\theta$	45
2.9	Geometria típica de uma suspensão com condições de contorno periódicas, mostrada em uma perspectiva bidimensional.	52
2.10	Esquemática de uma estrutura periódica contendo 9 células e 4 partículas na célula central, destacando-se as interações dipolares de uma partícula de referência em preto, com todas as outras partículas.	53
2.11	Esquemática de uma estrutura periódica contendo 9 células e 11 partículas na célula central, destacando-se o método da Mínima Imagem.	55
3.1	Esquemática para a segunda possibilidade.	67
4.1	<i>Box</i> com partículas suspensas em um fluido submetidas a um campo magnético oscilatório aplicado.	77
4.2	Desenhos esquemáticos das configurações da suspensão magnética considerando três tempos diferentes. Figura (a) para $t = 0$, cada partícula da suspensão possui momento de dipolo alinhado em uma direção aleatória. Figura (b) e Figura (c) para $t = t_1$ e $t = t_2$ respectivamente, representam os alinhamentos dos momentos dipolares das partículas na direção do campo magnético oscilatório.....	78
4.3	Figura (a), magnetização de equilíbrio em função do tempo de um fluido magnético exposto a um campo magnético externo estático, considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Figura (b), magnetização de equilíbrio oscilante, após à aplicação de um campo magnético oscilatório, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$	79
4.4	Magnetização oscilante devido à aplicação de um campo magnético externo oscilatório, modelo analítico de Berkov et al. (2009). Figura (a), foi considerado os parâmetros físicos com valores $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Na figura (b) considerou-se $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 4$	81

4.5	Susceptibilidade complexa do fluido magnético obtida através do modelo analítico de Berkov et al. (2009). Figura (a) e (b) representam a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular ω , considerado os parâmetros físicos com valores $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$. Na figura (c) e (d), parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular ω considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$	82
4.6	Curva de histerese magnética (caminho fechado) representada pela linha contínua. A linha tracejada representa a curva de magnetização inicial.	83
4.7	Comportamento do campo coercitivo com relação ao diâmetro da partícula (Leite, 2013).	87
5.1	Magnetização de equilíbrio da suspensão em função do número de partícula N para $\phi = 15\%$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$	90
5.2	Magnetização de equilíbrio em função de α para $\phi = 15\%$ e $\lambda = 1$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.	91
5.3	Magnetização de equilíbrio em função de ϕ com $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.	92
5.4	Magnetização de equilíbrio em função de λ com $\alpha = 1$ e $\phi = 15\%$. A linha contínua denota o modelo de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.	93
5.5	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função do número de partícula N para $\phi = 0.10$, $\alpha = \lambda = Pe = 1$ e $\omega = 4$ com interações dipolares e hidrodinâmicas.	94

5.6	Resultado numérico da magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na figura (a), foi considerado a frequência angular para $\omega = 0.5$, em (b), $\omega = 1.0$, em (c), $\omega = 2.5$ e (d), $\omega = 4.0$	95
5.7	Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\omega = 1$ e fig. (b) considerou-se $\omega = 4$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.	96
5.8	Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.1$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\omega = 1$ e fig. (b) considerou-se $\omega = 4$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.	97
5.9	Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\alpha = 5$ e fig. (b) considerou-se $\alpha = 10$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.	97
5.10	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI. ..	98
5.11	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.06$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI. ..	100

5.12	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI. ..	101
5.13	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. As linhas contínuas grossa e fina, representam o modelo de Berkov et al. (2009) respectivamente com, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$, os círculos e triângulos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ e os círculos e triângulos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$	102
5.14	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. As linhas contínuas grossa e fina, representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1$ e $\alpha = 5$ respectivamente, os círculos e quadrados preenchidos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\alpha = 5$ e os círculos e quadrados vazios representam os valores obtidos com o método MI para $\alpha = 1$ e $\alpha = 5$	103
5.15	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. com linha contínua, traço-ponto e pontilhada representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1$, $\alpha = 3$ e $\alpha = 5$ respectivamente e os losangos, triângulos e quadrados abertos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1$, $\alpha = 3$ e $\alpha = 5$	104
5.16	Suspensão de partículas magnéticas. Figura (a), com interações dipolares e figura (b), com interações dipolares e hidrodinâmicas, ambas considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Resultados obtidos por meio de simulação computacional de muitos corpos.	105

5.17	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.	106
5.18	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.06$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.	107
5.19	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.	108
5.20	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas grossa e fina representam o modelo de Berkov et al. (2009) respectivamente com, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$, os círculos e triângulos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ sem interações hidrodinâmicas e os losangos e quadrados vazios representam os valores numéricos obtidos utilizando o mesmo método para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ com interações hidrodinâmicas.	109

5.21	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas grossa, fina e tracejada, representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1, 3$ e 5 respectivamente, os círculos, triângulos e quadrados preenchidos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1, 3$ e 5 sem interações hidrodinâmicas e os losangos, triângulos e quadrados vazios representam os valores numéricos obtidos utilizando o mesmo método para, $\alpha = 1, 3$ e 5 com interações hidrodinâmicas.	110
5.22	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω . A linha contínua representa o resultado numérico com o método (DL)-Somos de Ewald sem interações hidrodinâmicas e a linha traço-ponto representa o resultado numérico com o método (DL)-Somos de Ewald com interações hidrodinâmicas. Os parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$	111
5.23	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função de Pe . Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE na ausência de IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE com IH ambas com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.10$ e $\omega = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.	113
5.24	Resultados numéricos da magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo obtidos com SE, com $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Na figura (a), foi considerado nas simulações $Pe = 1$, (b) com $Pe = 1.5$, (c) com $Pe = 2$ e (d) com $Pe = 3$	114
5.25	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de Pe para $\omega = 1$ e $\omega = 2$. Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.	115

5.26	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω , para vários Pe . Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.	116
5.27	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω , para vários Pe . Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.....	117
5.28	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH.....	118
5.29	Parte imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE sem IH para $\omega = 2$ e os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE considerando IH e para $\omega = 6$...	119
5.30	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de λ para $\alpha = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE na ausência de IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.	120
5.31	Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de λ para $\alpha = 1$, $\phi = 0.1$ e $Pe = 1$. Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.....	121
5.32	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de α para $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH, sendo os triângulos com $Pe = 1$, círculos com $Pe = 1.5$ e quadrados com $Pe = 2$	122

5.33	Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de α para $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH, sendo os triângulos com $Pe = 3$, círculos com $Pe = 4$, quadrados com $Pe = 5$ e losangos com $Pe = 6$. O encarte mostra o detalhe dos resultados numéricos para $4 \leq \alpha \leq 10$	123
5.34	Curvas de histerese para $\phi = 0.1$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico e os quadrados abertos representam o resultado numérico.	124
5.35	Curvas de histerese para $\phi = 0.1$, $\omega = 1$, $\alpha = 1$ e $Pe = 1$, obtidas por meio dos resultados numéricos.	125
5.36	Na sequência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 2$ na presença de IH.	126
5.37	Na sequência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 10$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 15$ na presença de IH.	127
5.38	Na sequência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 1$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 2$ na presença de IH.	128
5.39	Na sequência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 10$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 15$ na presença de IH.	129

5.40 (a): diagramas de fase e (b): curvas de histerese da magnetização de equilíbrio para vários Pe . Outros parâmetros físicos utilizados nestas simulações são $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.10$ e $\omega = 1$ na presença de IH.	130
5.41 (a): diagramas de fase e (b): curvas de histerese da magnetização de equilíbrio para vários Pe . Outros parâmetros físicos utilizados nestas simulações são $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.10$ e $\omega = 2$ na presença de IH.	131
5.42 Área de histerese normalizada pelo máximo em função de Pe para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.....	132
5.43 Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Resultado analítico representado por linha contínua e o resultado numérico, representado por losangos abertos. Na fig. (a) considerou-se nas simulações $\alpha = 1$ e na fig. (b) com $\alpha = 5$	133
5.44 Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos. A linha traço ponto representa o resultado numérico para $\alpha = 1$, a linha contínua fina para $\alpha = 5$ e a linha contínua grossa para $\alpha = 10$	134
5.45 Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $\alpha = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos. A linha traçada representa o resultado numérico para $Pe = 1$, a linha contínua fina para $Pe = 1.5$ e a linha contínua grossa para $Pe = 2$	135
5.46 Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos.....	136
6.1 Esboço de um modelo prototípico para magnetohipertermia: (a) mostra um tumor impregnado com partículas magnéticas sob ação de um campo magnético oscilatório, (b) mostra uma ampliação de uma região típica dentro do tumor com as partículas magnéticas e (c) detalhe de uma partícula magnética típica com uma camada de surfactante, a fim de evitar a formação de aglomerados (Figura desenvolvida pelo prof. Rafael Gabler).....	138

6.2	Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.	143
6.3	Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.	143
6.4	Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.	145
6.5	Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega \rightarrow \infty$. A linha contínua representa o resultado analítico, os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.	146
6.6	Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH.	147
6.7	Taxa média de aumento de temperatura em função de λ para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.	149
6.8	Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Resultado numérico com SE e sem IH com quadrados abertos e resultado analítico representado por linha contínua.	151
6.9	Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam o resultados numéricos com SE e sem IH para $Pe = 1$, $Pe = 1.5$ e $Pe = 2$	151
6.10	Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $Pe = 3$, $Pe = 4$, $Pe = 5$ e $Pe = 6$	152

6.11	Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.1, Pe = 1$ e $\omega = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico, a linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.	153
6.12	Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.1, Pe = 1.5$ e $\omega = 1$. A linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.	153
6.13	Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.1, Pe = 2.0$ e $\omega = 1$. A linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.	154
6.14	Taxa de aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.1, Pe = 1$ e $\omega = 1$. A linha contínua representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha tracejada representa o resultado numérico com SE e IH. ...	154
6.15	Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.5$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.0$	156
6.16	Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, \phi = 0.01$ e $Pe = 1$. Os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE para $\omega = 3$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE para $\omega = 1$	157
6.17	Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1, \lambda = 1, e Pe = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $\phi = 0.1$ e $\omega = 1$, os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH para $\phi = 0.1$ e $\omega = 1$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $\phi = 0.01$ e $\omega = 3$	157
6.18	Aumento da temperatura média em função de ϕ para o tempo adimensional de $t = 35 \times 10^5$ com $\alpha = 1, \lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.5$ e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.0$	158

6.19	Campo mag1 em função do tempo, representado por traço-ponto e campo mag2 representado por linha contínua.....	159
6.20	Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, símbolos fechados e abertos representam os numéricos com SE, sem IH.....	161
6.21	Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 5$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico, símbolos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE, sem IH.	161
6.22	Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.....	162
6.23	Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$, considerando somente o campo mag2. Símbolos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.	162
6.24	Taxa média de aumento de temperatura em função de λ para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Círculos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.	163
6.25	Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1$, $Pe = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Quadrados fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE sem IH.....	163

LISTA DE SÍMBOLOS

Lista de Símbolos

∇	Operador gradiente
$\nabla \cdot$	Operador divergente
$\nabla \times$	Operador rotacional
∇^2	Operador Laplaciano
$\frac{\partial}{\partial t}$	Operador derivada temporal
$\frac{D}{Dt}$	Operador derivada material
δ_{ij}	Operador delta de Kronecker
$\delta(x)$	Função delta de Dirac
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
κ_m	Permeabilidade relativa
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
μ	Permeabilidade magnética do meio
η	Viscosidade dinâmica do fluido
ν	Viscosidade cinemática do fluido
ρ	Massa específica
ρ_s	Densidade de polo magnético
σ	Tensor de tensões do meio
σ_h	Tensor de tensões hidrodinâmico
χ	Suceptibilidade magnética
\mathbf{B}	Indução magnética
\mathbf{E}	Campo Elétrico

H	Campo magnético
J	Densidade de corrente elétrica
M	Magnetização
u	Campo de velocidade
I	Tensor identidade
D	Tensor taxa de deformação
W	Tensor taxa de rotação
g	Aceleração da gravidade
x	Vetor posição espacial
p	Pressão
p^*	Pressão mecânica
L	Momento angular
t	Vetor de tensões
\mathcal{D}_t	Coefficiente de difusão Browniano translacional
\mathcal{D}_R	Coefficiente de difusão Browniano rotacional
M_s	Magnetização de saturação
M_0	Magnetização de equilíbrio
M_d	Magnetização do sólido
k_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura
U_s	Velocidade de Stokes
k	Vetor número de onda
Φ_m	Potencial magnético
Λ, \mathcal{Y} e Υ	Parâmetros de calibração de forças repulsivas
ℓ	Escala típica de comprimento
r	Distância entre os centros das esferas
a	Raio de uma esfera
ϵ_{ij}	Distância entre as superfícies de duas esferas i e j

Lista de Abreviaturas

MHD	Magnetohidrodinâmica
FHD	Ferrohidrodinâmica
DL	Dinâmica de Langevin
<i>MH</i>	Magnetohipertermia
SE	Somas de Ewald
MI	Mínima Imagem
NPM	Nano partícula magnética

Grupos Adimensionais

<i>Re</i>	Número de Reynolds
<i>Pe</i>	Número de Péclet
<i>Pe_r</i>	Número de Péclet rotacional
<i>St</i>	Número de Stokes
<i>St_r</i>	Número de Stokes rotacional
ϕ	Fracção volumétrica de partículas
α	Interação campo-partícula
λ	Interação partícula-partícula

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Fluidos Magnéticos

Fluido magnético ou ferrofluido é uma classe particular de suspensão magnética coloidal, composta pela adição de pequenas partículas de material magnético, possuindo um diâmetro médio de aproximadamente 10 nm em um fluido base, como óleos sintéticos, éster ou água (Rinaldi et al., 2005; Odenbach, 2009). Um fluido magnético típico é geralmente composto por um conjunto de partículas de ferrita ou magnetita em escalas nanométricas dispersas em um fluido transportador. Para que um fluido magnético seja útil para aplicações práticas, ele deve ser estável com relação a formação de agregados devidos às forças atrativas entre partículas. A interação entre partículas ocorre diretamente por três mecanismos: repulsão estérica, forças atrativas de Van der Waals, ambas forças de curto alcance, e força magnética, devido a interação entre os momentos de dipolo das partículas. Para evitar forças atrativas de curto alcance, geradoras de agregados na suspensão, são aplicados na superfície das partículas uma fina camada de surfactantes (figura 1.1), que agem como nano molas repulsoras evitando a formação de agregados (Jansons, 1983). Outro exemplo de suspensões magnéticas, são as suspensões magnetoreológicas (SMR) sintetizadas com partículas magnetizáveis de tamanho micrométrico, dispersas num fluido base não magnético. Esta

segunda classe de suspensões magnéticas, diferencia-se dos fluidos magnéticos devido ao tamanho micrométrico das partículas. Dessa forma, as suspensões magnetoreológicas não estão sujeitas ao movimento Browniano, induzido por agitação térmica molecular, resultando em uma maior instabilidade com relação a formação de agregados e maior memória magnética (Dang et al., 2000).

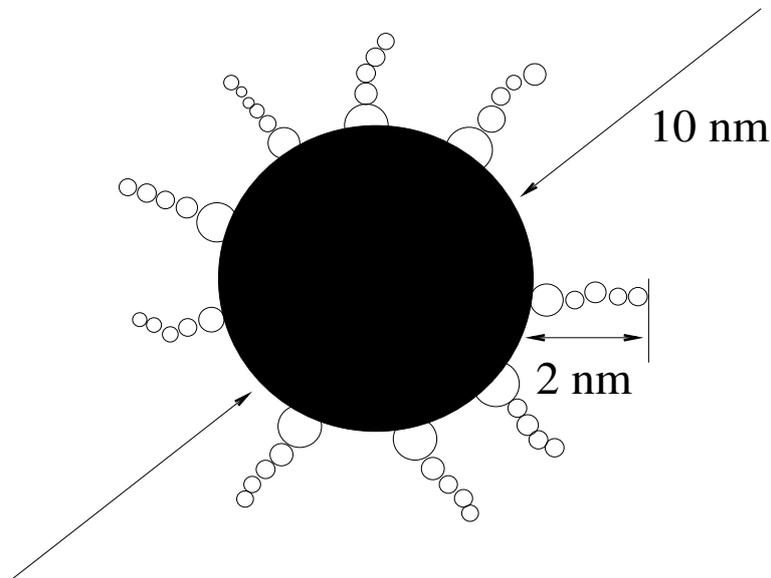


Figura 1.1: Partícula magnética com uma camada superficial de surfactantes (Gontijo, 2013).

De acordo com Rosensweig (1985), uma forma de manter a estabilidade de um fluido magnético é satisfazendo a seguinte relação:

$$\frac{\text{Energia térmica}}{\text{Energia magnética}} = \frac{k_B T}{\mu_0 M_d H v_p} \geq 1, \quad (1.1)$$

dessa forma, a estabilidade de um fluido magnético é preservada quando a energia térmica associada ao movimento Browniano é maior ou igual à energia magnética. Na equação (1.1), k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura do fluido, μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo, M_d a magnetização do material que constitui as partículas, H é a intensidade do campo magnético e v_p é o volume das partículas. O diâmetro máximo de partícula esférica que satisfaz uma condição de estabilidade é determinado por

$$d \leq \left(\frac{6k_B T}{\pi \mu_0 M H} \right)^{1/3}, \quad (1.2)$$

isso significa que para garantir a estabilidade de uma suspensão magnética, as partículas devem ser pequenas ($\approx 10\text{nm}$).

As aplicações da dinâmica de fluidos na engenharia, até recentemente, eram restritas a sistemas em que campos elétricos e magnéticos não desempenhavam nenhum papel. No entanto, a combinação de campos magnéticos e fluidos polares, acarretou mais atenção por conta de diversas aplicações em vários campos, tais como reações termonucleares controladas, projeto de reatores químicos, medicamentos e impressão silenciosa de alta velocidade (Rinaldi et al., 2005).

A ferrohodinâmica é uma área da Mecânica dos Fluidos que estuda o movimento de fluidos influenciados por forças de polarização magnética. É razoável desde o início enfatizar a diferença entre ferrohodinâmica (FHD) e magnetohodinâmica (MHD). Em MHD a força que atua sobre o volume de fluido é a força de Lorentz, resultante da passagem de uma corrente elétrica em um fluido condutor não necessariamente magnético, formando um ângulo com a direção do campo magnético aplicado. No entanto, em FHD não precisa haver corrente elétrica atuando no fluido e geralmente não há nenhuma. A força magnética em FHD é uma força de polarização que ocorre num meio magnetizável na presença de um campo magnético. Materiais ferromagnéticos são compostos por domínios nos quais os momentos magnéticos dos átomos individuais são orientados numa direção fixa.

Se a concentração das partículas magnéticas não for elevada, os efeitos das interações entre as partículas magnéticas podem ser desprezados. Neste caso, as partículas magnéticas, cada uma delas com um momento magnético, podem ser tratadas como pequenos ímãs permanentes. Portanto, o comportamento magnético de todo o líquido terá caráter paramagnético e pode ser descrito usando a equação de Langevin para a magnetização de sistemas paramagnéticos (Rosensweig, 1985).

Modelos teóricos para fluido magnético diluídos, em que as interações magnéticas entre partículas podem ser desprezadas, levam a resultados muitos consistentes para essas suspensões extremamente diluídas, mas para suspensões mais densas esses modelos não podem explicar as propriedades e comportamentos dos fluidos magnéticos, pois as interações entre partículas tornam-se importantes, conduzindo não apenas a correlações entre partículas, mas também, ao surgimento de cadeias e agregados, alterando significativamente

as características efetivas dos fluidos magnéticos (Ivanov e Kuznetsova, 2001). Em vários trabalhos, na literatura, as interações hidrodinâmicas entre as partículas magnéticas são negligenciadas. Estudos teóricos apontaram a necessidade de estudar o efeito das interações hidrodinâmicas para uma descrição mais realista do comportamento microestrutural das suspensões magnéticas (Berkov et al., 2009). Simulações em computador com interações hidrodinâmicas mostraram que mesmo quando esse mecanismo é uma ordem de magnitude mais fraca que as forças brownianas, ainda induz efeitos de refluxo que dominam a redução da velocidade média de sedimentação com o aumento da fração volumétrica de partículas (Gontijo e Cunha, 2015 e 2017). Isso significa, que mesmo para suspensões coloidais as interações hidrodinâmicas podem ser importantes (Padding e Louis, 2004).

O estudo de sistemas monodispersos é extremamente relevante para que o efeito de cada fator possa ser analisado separadamente nas propriedades macroscópicas de fluidos magnéticos densos. Dessa forma, compreender e prever a reologia e dinâmica das suspensões brownianas ainda é um assunto de interesse fundamental e tecnológico. A presença de interações hidrodinâmicas no sistema de muitos corpos também dificulta o tratamento teórico dessa matéria. Assim, o desenvolvimento de técnicas de simulação, considerando efeito das interações hidrodinâmicas, ainda requer avanços adicionais (Banchio e Brady, 2003).

O foco principal deste trabalho é examinar a influência das interações dipolares e interações hidrodinâmicas na resposta dinâmica de magnetização de um fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório. Dessa forma, estudar o mecanismo de dissipação de energia magnética, na forma de calor, e conseqüentemente o desempenho na hipertermia magnética. Alguns dos principais resultados deste trabalho, foram publicados em *Physics of Fluids*, para maiores detalhes veja Guimarães, Cunha e Gontijo (2020).

1.2 Aplicações de Fluidos Magnéticos

A maioria das aplicações tecnológicas associadas aos fluidos magnéticos ocorre na presença de um campo magnético aplicado. Essa interação campo-dipolo de longo alcance exerce um torque magnético nas partículas que equilibra os torques brownianos resultantes das flutuações moleculares dos líquidos. Esse equilíbrio de torque rege a dinâmica microestrutural do material. A possibilidade de monitorar e controlar as propriedades físicas dos

fluidos magnéticos através de um campo aplicado, tornou esses materiais altamente atraentes e promissores para uma variedade de possíveis aplicações (Rosensweig, 1985; Odenbach, 2009; Hadavand et al., 2013).

No campo de aplicações biológicas e biomédicas avançadas, fluidos magnéticos têm atraído bastante interesse, por exemplo: na liberação de fármacos, imagem por ressonância magnética, engenharia térmica e tratamento de câncer por magnetohipertermia (Rinaldi et al., 2005; Xuan et al., 2005; Odenbach, 2009). Na técnica de magnetohipertermia, um fluido magnético é introduzido no tumor e submetido a um campo magnético oscilatório. A rotação dos momentos de dipolos magnéticos das partículas devido ao campo aplicado, induz um armazenamento de energia magnética pelas partículas e também uma dissipação na forma de calor de uma parte desta energia transmitida pelo campo, acarretando um aumento local na temperatura do tumor. Portanto, as células cancerígenas, sendo mais sensíveis ao aumento de temperatura que as células saudáveis, são enfraquecidas ou destruídas, levando a uma intensificação no processo de cura, em conjunto com outros tratamentos como a quimioterapia (Zubarev, 2019; Branquinho et al., 2013).

Um dos problemas mais importantes na tecnologia moderna é o resfriamento de dispositivos eletrônicos e as limitações estabelecidas na temperatura máxima, que não pode exceder o valor aceitável para garantir o trabalho correto de um dispositivo. A solução para o problema de resfriamento é muito importante para o bom funcionamento desses dispositivos, que sofrem aquecimentos no tempo com bastante intensidade tornando o resfriamento desses elementos muito importante. Da grande necessidade do desenvolvimento de tecnologias de arrefecimentos eficientes, Lipnicki e Waloryszek (2005) por meio de estudos sobre escoamentos de fluidos magnéticos em tubos, desenvolveram um dispositivo de refrigeração para micro sistema eletromecânico, apresentando-se eficiente para remoção de calor dos chips. Além disso, Timko et al. (2009) exploraram a influência do campo magnético e elétrico combinado na permissividade do papel transformador utilizado em transformadores de potência. Os experimentos mostraram que a permissividade do sistema isolador consistindo em papel de transformador puro e papel de transformador impregnado depende naturalmente do número de papel camadas e que o efeito magnetodielétrico dependia da concentração de nanopartículas de magnetita em fluidos magnéticos.

Aplicações sobre convecção magnética vem sendo desenvolvidas em ambientes nos quais

as forças gravitacionais não são capazes de movimentar o fluido, tornando-se bastante utilizada na indústria aeroespacial. Gontijo e Cunha (2012) apresentaram resultados de um trabalho experimental relacionados à convecção magnética dentro de cavidades. Os autores mostraram que o campo magnético aumenta a instabilidade no fluxo convectivo, levando a uma mistura mais eficaz, e assim, uma distribuição de temperatura mais estatisticamente homogênea dentro da célula de teste.

A modificação da superfície de nanopartículas por moléculas orgânicas é importante não apenas para a fabricação de nanocompósitos, mas também para aplicações biológicas. Nanopartículas magnéticas modificadas com moléculas orgânicas têm sido amplamente utilizadas para aplicações biotecnológicas e biomédicas. Elas oferecem um alto potencial para numerosas aplicações biomédicas, como separação de células, extração automatizada de DNA e direcionamento de genes (Yoza et al., 2003; Kuhara et al., 2004; Lázaro et al., 2005). Com o propósito de aplicações biomédicas, Tetsuya et al. (2006) apresentaram estudos referente à síntese de nanopartículas magnéticas de óxido de ferro para o desenvolvimento de um sistema biomolecular modificando a superfície da partícula por moléculas orgânicas.

A primeira evidência experimental de um efeito de viscosidade negativa num fluido magnético foi apresentada por Bacri et al. (1995). Em um escoamento de Poiseuille, a vorticidade é equilibrada por um campo magnético constante que impede a rotação de partículas magnéticas individuais. Mutuamente, um campo magnético alternado auxilia a vorticidade e favorece esta rotação. Assim, a energia magnética é parcialmente transformada no momento angular das partículas, que por sua vez é convertido em um movimento hidrodinâmico do fluido. Rychkov et al. (2006) controlaram a viscosidade de um fluido magnético em escoamento, através da aplicação de um campo magnético externo. O efeito da mudança na viscosidade da suspensão foi devido ao alinhamento da orientação das partículas magnéticas na direção de um campo externo aplicado, gerando o aumento da viscosidade efetiva do fluido.

Zahn (1995) apresentou estudos sobre bombeamento ferrohidrodinâmico em campos magnéticos oscilatórios uniformes, em que os campos magnéticos aplicados ao longo e transversalmente ao eixo da conduta são espacialmente uniformes e variam com o tempo de forma senoidal. Além disso, Gwan (1999) projetou uma bomba linear de fluido magnético, em

que, é ativado por pulsos de deslocamento de campo magnético arrastando a água dentro da bomba. Lindner et al. (2013) realizaram simulações com o intuito de compreender a influência das propriedades magnéticas para aplicação nos processos de separação magnética de alto gradiente, nos quais, as forças magnéticas externas foram simuladas por meio do método de elementos finitos e incorporadas numa simulação computacional de dinâmica de fluidos.

O equilíbrio de uma coluna de fluido magnético dentro de um capilar cilíndrico foi investigado na presença de um campo magnético externo uniforme por Bashtivoi (2002), em que constatou-se, que devido à deformação do menisco do fluido, a queda de pressão superficial no fluido diminui nos campos longitudinal e transversal ao eixo capilar. Cunha, Sousa e Morais (2002) analisaram o comportamento dinâmico de uma bolha em um fluido magnético incompressível, notando uma drástica redução das instabilidades, inibindo o colapso dessas bolhas, atenuando a cavitação de máquinas hidráulicas. Uma outra aplicação, em que o processo de extração de petróleo e de controle de desastre ecológicos podem ser favorecido, é a separação de óleo e água por meio magnéticos (Cunha e Sobral, 2004). Uma análise de estabilidade linear para avaliar o comportamento das ondas de concentração em leitos fluidizados polarizados foi realizada por Cunha, Sobral e Gontijo (2013). As interações das partículas magnetizadas com um campo magnético externo produziram uma estabilização mais forte das instabilidades lineares em leitos fluidizados.

1.3 Revisão Bibliográfica

1.3.1 Modelagem de Fluidos Magnéticos

A magnetização na escala macroscópica, representa o efeito médio das componentes dos momentos de dipolo na direção do campo magnético aplicado. Também é dependente da microestrutura do fluido magnético influenciando em suas propriedades. Dessa forma, o entendimento das propriedades relacionadas à microestrutura dos fluidos magnéticos nos permite quantificar as propriedades de transporte desses materiais e controlar sua estabilidade contra a formação de agregados de uma forma mais eficaz. Portanto, é importante entender o comportamento da magnetização com o campo magnético aplicado, e assim,

descrever o fluido magnético de maneira mais eficiente.

Com o propósito de estudar os efeitos das interações dipolares entre nanopartículas na magnetização, um modelo estatístico, baseado na relação entre a função de correlação de pares de um sistema espacial homogêneo de partículas dipolares e a magnetização, foi desenvolvido para descrever as propriedades magnetostáticas dos fluidos magnéticos densos e as propriedades dielétricas dos fluidos polares (Ivanov et al., 2001). Esta função de correlação de pares foi calculada com auxílio da teoria de perturbações de primeira ordem sobre a intensidade da interação dipolar, perante a presença de um campo magnético externo uniforme. Além disso, um novo tipo de modelo bidimensional foi desenvolvido utilizando o método da *lattice*-Boltzmann de modo a estudar as propriedades reológicas dos fluidos magnéticos (Hirabayashi et al., 2001). Este modelo baseia-se no algoritmo de fluxo contínuo para partículas que se movem na mesma grade hexagonal padrão. Dessa forma, cada partícula ocupa um estado marcado por dois vetores, o que torna possível expressar a rotação do momento magnético efetivo, apresentando-se adequado para simular vários comportamentos de fluidos magnéticos influenciados pela rotação do momento magnético. Um outro modelo numérico abrangente de nanopartículas magnéticas foi desenvolvido com uma abordagem do modelo de esfera macia, para estudos da influência das interações magnéticas na magnetização, fornecendo uma base de fundamental compreensão da física real das nanopartículas e de suas interações dipolares (Li et al., 2017).

Propriedades médias de magnetização dos fluidos magnéticos foram calculadas por meio de um modelo de formação de agregados combinado com a teoria de campo médio (Ivanov et al., 2004). Considerando interações dipolares entre partículas, foram obtidas expressões para a magnetização e susceptibilidade inicial. Ao comparar os resultados alcançados com as simulações de dinâmica molecular, foi observado que, em grandes acoplamentos dipolares, o modelo de formação de agregados parece apresentar melhores previsões do que outras abordagens analíticas, apoiando a ideia de que a formação de cadeias e agregados de partículas magnéticas é um elemento de fundamental importância nos estudos de modelos com fortes interações dipolares. Ainda, um outro modelo numérico de dinâmica do fluido magnético foi desenvolvido por Berkov et al. (2007). Considerando que a anisotropia magnetocristalina do material magnético das partículas do fluido magnético é finita, de modo que o momento magnético da partícula gire em relação à própria partícula. Portanto, após

o desligamento do campo externo, simularam o comportamento da magnetização de um fluido magnético para dois tempos distintos de relaxação magnética, isto é, comparando os resultados com o tempo de relaxação de Néel com o tempo de relaxação Browniano.

A mudança no comportamento reológico é frequentemente definida como uma alteração na viscosidade efetiva do fluido. Assim, Zubieta et al. (2009) apresentaram um modelo de magnetização que busca capturar a mudança no comportamento reológico devido à aplicação de um campo magnético externo na suspensão magnética. No caso do fluido magnético, um modelo newtoniano foi usado para modelar a variação na viscosidade que é observada quando um campo magnético é aplicado. Outros estudos sobre o efeito da viscosidades de uma suspensão quando submetida a um campo magnético externo, cujas as partículas sólidas possuem momentos magnéticos fixos, foram apresentados por Shliomis (1972). O modelo proposto pelo autor, conseguiu uma boa concordância com resultados experimentais. Neste modelo observaram que o campo magnético de orientação impede a rotação das partículas em um escoamento de um líquido vorticial, tendo como resultado o aumento da viscosidade efetiva. Entretanto, o movimento browniano e as forças hidrodinâmicas exercem um efeito desorientador nos momentos magnéticos. Além disso, Zubarev et al. (2002) estudaram teoricamente e experimentalmente as propriedades reológicas dos fluidos magnéticos densos. Nos experimentos a dependência da viscosidade efetiva no campo magnético mostrou-se muito mais significativa do que o previsto por teorias conhecidas. Desenvolveram então um novo modelo teórico para explicar e descrever esses resultados. Este modelo baseia-se no pressuposto de que a formação de cadeias e agregados no fluido magnético induz a um forte efeito magnetoviscoso.

Tendo em conta as interações entre as partículas magnéticas, um modelo foi proposto para obtenção de uma descrição quantitativa dos efeitos magnetoviscosos (Odenbach, 2003). Uma pequena fração volumétrica de partículas no fluido, acarretam uma formação de cadeias e agregados de partículas que dominam as propriedades reológicas dos fluidos na presença de campos magnéticos. Dessa forma, verificou-se através do modelo que a viscosidade de um fluido magnético pode ser fortemente influenciada pela presença de um campo externo. Ilg (2008) estudou também, por meio de simulações computacionais, a influência dessas forças atrativas entre partículas na estrutura e dinâmica dos fluidos magnéticos. Constatando que na presença de um campo magnético, as forças atrativas suficientemente

fortes levam à formações de um conjunto de cadeias e agregados de partículas magnéticas e conseqüentemente uma mudança nas propriedades reológicas do fluido. Ainda, Holm e Weis (2005) revisaram avanços sobre o comportamento dos fluidos magnéticos, se concentrando em questões de comportamento de fase e formação de microestrutura com e sem um campo magnético aplicado externamente, e realizaram uma análise da influência da polidispersidade que é uma característica quase inevitável de qualquer fluido magnético real. Além do mais, Rinaldi et al. (2005) apresentaram avanços em reologia e escoamentos de fluidos magnéticos, incluindo, propondo modelos para estudos sobre o relaxamento de magnetização e equações governantes da ferrohidrodinâmica.

Um outro modelo proposto por Liu et al. (2010) foi desenvolvido para estudos da evolução microestrutural, propriedades reológicas e as energias potenciais de fluidos magnéticos sob cisalhamento. Suas simulações de dinâmica molecular foram realizadas baseadas em uma teoria de dipolo magnético. A magnetização nos campos magnéticos fracos e moderados, apresenta-se maior no sistema polidisperso do que no monodisperso, de acordo com simulações utilizando o método de Monte Carlo realizadas por Kristóf e Szalai (2003). Analisaram também a influência da polidispersidade nas propriedades de equilíbrio dos sistemas com fortes interações dipolares e forças repulsivas de curto alcance. Gwan (2002) apresentou um modelo para obtenção da configuração do fluido magnético sob força de um campo externo aplicado. Para a análise da configuração do fluido magnético, foram resolvidos simultaneamente as equações de Maxwell e Navier-Stokes, para a energia do campo magnético e energia mecânica do fluido respectivamente.

Para que as equações de continuidade e momento fossem escritas em termos de variáveis médias, um modelo foi proposto por Sobral e Cunha (2003), os quais, investigaram a estabilidade de um leito fluidizado magnético contra distúrbios da onda plana de pequenas amplitudes. Além disso, Cunha e Sobral (2004) apresentaram as equações contínuas que regem o movimento de um fluido magnético. Os estudos foram aplicados, para descrever o movimento de uma gota magnética livremente suspensa em um fluido viscoso submetido a um campo magnético permanente, determinando soluções assintóticas para escoamentos em tubos. Também, Cunha e Couto (2008) desenvolveram uma nova formulação geral para a integral de contorno hidrodinâmica-magnética tridimensional para superfícies livres magnéticas em escoamentos viscosos de baixos números de Reynolds. Utilizando o método

numérico de Somas de Ewald para o cômputo das interações dipolares de longo alcance, Wang et al. (2002) desenvolveram um modelo para fluidos magnéticos e estudaram em detalhes a susceptibilidade inicial, as curvas de magnetização e a microestrutura do fluido magnético em diferentes concentrações de partículas e momentos dipolares variados, por meio de simulações de dinâmica molecular.

1.3.2 Magnetohipertermia e seu Desenvolvimento Científico

O câncer é uma das principais causas de mortalidade humana. Os tratamentos atuais, como cirurgia e quimioterapia, podem ter efeitos colaterais indesejáveis, incluindo danos ao tecido saudável. A hipertermia magnética, chamada também de magnetohipertermia, é um campo de tratamento alternativo do câncer, que pode matar as células cancerosas por elevação significativa da temperatura das células tumorais, mantendo o tecido saudável envolvente a um nível moderado (Kappiyoor et al., 2010). Esta técnica, consiste em inserir partículas magnéticas na região tumoral, diretamente no tumor ou por via intravenosa em uma suspensão coloidal, direcionada magneticamente para o tecido canceroso (Day et al., 2009). Em seguida aplica-se um campo magnético oscilatório nesta região. A rotação das partículas em razão do campo magnético oscilatório aplicado, acumuladas no tumor, induz um aumento local de temperatura devido a energia magnética dissipada pela partícula na forma de calor. Este aumento local de temperatura produz regiões com temperaturas médias que variam entre 42° - 48° C (Zubarev et al., 2015a; Zubarev et al., 2015b; Zubarev, 2019). Devido às células cancerígenas serem mais sensíveis a um aumento de temperatura quando comparadas com as células saudáveis, este aumento local de temperatura do tumor acaba sendo mais prejudicial para estas, causando sua morte por termo-apoptose, o que faz com que a técnica de magnetohipertermia seja extremamente promissora, especialmente para o tratamento de tumores pequenos ou profundos (Day et al., 2009; Zubarev et al., 2015a).

Para um tratamento ideal com magnetohipertermia, deve-se aumentar suficientemente a temperatura das células tumorais, mantendo a temperatura dos tecidos saudáveis abaixo de 42° C. Uma maneira de aumentar o efeito da magnetohipertermia é elevar a concentração de partículas na região tumoral. No entanto, a partir de determinada concentração de partículas, suas interações dipolares e hidrodinâmicas não podem ser ignoradas (Berkov et al.,

2009). Dessa forma, entender e controlar a influência de interações magnéticas dipolares e hidrodinâmicas de longo alcance nas taxas de incremento de temperatura, especialmente em regimes de maior concentração de partículas, torna-se de fundamental importância. A figura (1.2) ilustra de modo esquemático o funcionamento da técnica de magnetohipertermia. De acordo com a figura, as nanopartículas magnéticas-(NPMs) biocompatíveis, são introduzidas e acumuladas na região tumoral. Uma força magnética pode ser utilizada para atrair ativamente as nanopartículas para o espaço do tumor. As NPMs direcionadas ao tumor, são submetidas a um campo magnético oscilatório, gerando calor e aquecendo-se localmente. A temperatura tem que ser mantida no intervalo de $42^{\circ}\text{C} - 48^{\circ}\text{C}$, preferencialmente por no mínimo 30 minutos para as células cancerígenas morrerem por termo-apoptose. Acima deste intervalo, ocorrem as mortes das células cancerígenas e células saudáveis próxima ao tumor por termo-necrose. Nesse processo de termo-necrose as células ao morrerem espalham o material celular, provocando uma resposta inflamatória (Moroz et al., 2002).

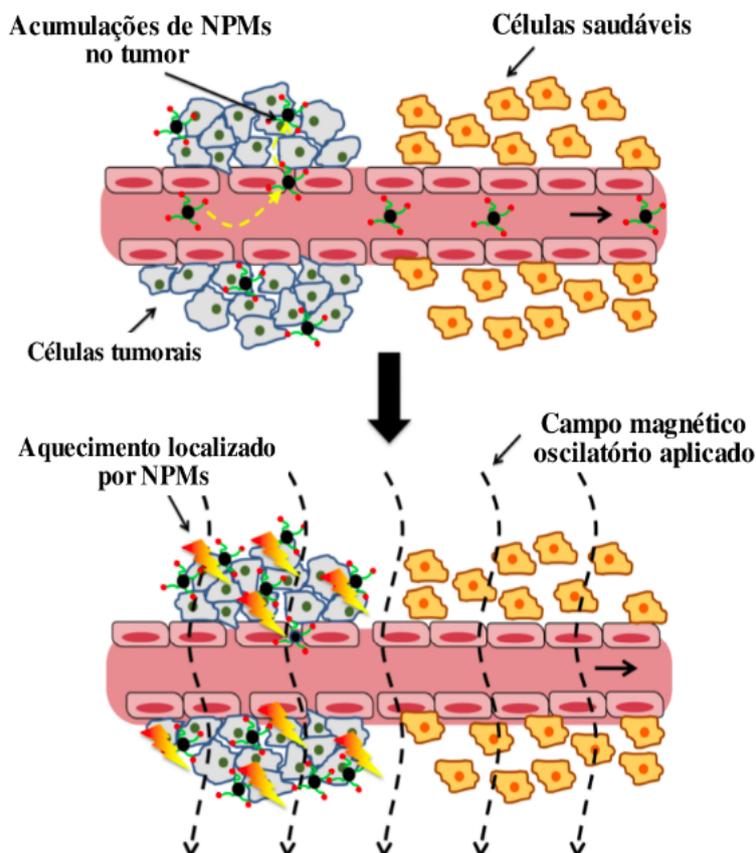


Figura 1.2: Ilustração esquemática do princípio de magnetohipertermia (Cole et al., 2011).

Do ponto de vista físico, para que seja possível prever a taxa de aumento da temperatura, deve-se conhecer o comportamento da magnetização da suspensão em função do tempo. Assim, dado um campo aplicado do tipo $H_z = H_0 \sin(\omega t)$, $H_x = H_y = 0$, sendo $H_z(t)$ a função que expressa o comportamento do campo aplicado em função do tempo, H_0 a amplitude do campo aplicado, ω a frequência angular e t o tempo. A expressão capaz de computar a taxa de aumento da temperatura no tempo é dada por (Zubarev e Yushkov, 1998; Berkov et al., 2009; Zubarev et al., 2015b)

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\mu_0}{\rho_e c_e} \frac{1}{T} \int_0^T M^*(t) \frac{dH_z}{dt} dt = \frac{\mu_0 H_0 \omega}{\rho_e c_e} \frac{1}{T} \int_0^T M^*(t) \cos(\omega t) dt, \quad (1.3)$$

também expressa por

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\mu_0 H_0^2 \omega}{\rho_e c_e} \chi''(\omega), \quad (1.4)$$

no qual θ representa a temperatura absoluta de uma região com partículas magnéticas, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, $\rho_e = \rho_1 \phi + (1 - \phi) \rho_0$ é a densidade específica, $c_e = c_1 \phi + (1 - \phi) c_0$ é o calor específico, os índices 0 e 1 representam respectivamente as partículas e o meio e $M^*(t)$ representa o comportamento da magnetização dimensional no tempo. O termo $\chi''(\omega)$ é a parte imaginária da susceptibilidade complexa, descrita com mais detalhe no capítulo 4, denotada por

$$\chi''(\omega) = \chi_s \frac{1}{T} \int_0^T M(t) \cos(\omega t) dt, \quad (1.5)$$

em que $\chi_s = M_s/H_0$ é a susceptibilidade de saturação, T é o período de aplicação do campo oscilatório sendo um múltiplo de $2\pi/\omega$, $M(t)$ representa o comportamento da magnetização adimensional no tempo.

A frequência e amplitude do campo magnético oscilatório aplicado usado para gerar o aquecimento é limitada por respostas fisiológicas destrutivas, como por exemplo, estimulação dos músculos periféricos e esqueléticos, estimulação cardíaca, arritmia e aquecimento indutivo inespecífico do tecido. Dessa forma, para aplicações de magnetohipertermia seguras ao ser humano, o campo magnético oscilatório aplicado é utilizado na faixa de $H_0 = 0 - 15$ kA/m e a frequência na faixa de 0,05 - 1,2 MHz (Pankhurst et al., 2003).

Uma das principais informações sobre a técnica de magnetohipertermia é a taxa na qual a temperatura do tumor aumenta (equação 1.4). Essa taxa depende da resposta da magnetização de comportamento oscilatório do fluido magnético. Modelos teóricos para fluidos

magnéticos diluídos, onde as interações dipolares entre partículas são negligenciadas, levam a resultados consistentes dessa taxa apenas para suspensões magnéticas extremamente diluídas. Mas para suspensões mais densas, onde essas interações se tornam importantes, observa-se um desvio significativo entre teoria e experimentos (Ivanov e Kuznetsova, 2001; Landi et al., 2017). Do ponto de vista das aplicações modernas, as concentrações de partículas variando entre 5 e 10 % são consideradas relativamente altas. Mesmo para baixas concentrações de partículas, experimentos mostram que forças dipolares entre partículas magnéticas em campos magnéticos fortes, induzem a formação de cadeias e agregados de partículas, afetando as propriedades macroscópicas dos fluidos magnéticos (Rinaldi et al., 2005).

Estudos de fluidos magnéticos submetidos a um campo magnético oscilatório externo mostram que os efeitos das interações dipolares na suscetibilidade complexa $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ de um fluido magnético aumentam o valor absoluto de sua parte imaginária com um mudança de pico para frequências mais baixas (Berkov e Gorn, 2001). A relação, entre a suscetibilidade complexa e a viscosidade magnética dos fluidos magnéticos, foi apresentada por Fannin et al. (1995). Os resultados obtidos em experimentos mostraram que, embora as interações dipolares entre as partículas tenham um efeito substancial nas propriedades dos ferrocolóides, o efeito da interação hidrodinâmica entre as partículas também pode ser relevante. Com o auxílio das simulações da dinâmica de Langevin, um importante artigo de Berkov e Gorn (2001) mostrou como um grau extra de liberdade relacionado à rotação interna dos dipolos magnéticos pode afetar a suscetibilidade complexa dos fluidos magnéticos. Portanto, as informações apresentadas acima apontam para a importância de explorar questões relevantes relacionadas à resposta instável da magnetização de fluidos magnéticos como a influência das das interações hidrodinâmicas e o efeito de uma escala de tempo de relaxação magnética na suscetibilidade complexa.

A descrição física referente à dinâmica de magnetização de fluidos magnéticos submetidos a um campo oscilatório pode ser fornecida através da determinação das partes reais e imaginárias da suscetibilidade complexa (Fannin et al., 1988; Batrudinov et al., 2017). A parte real está relacionada com o armazenamento da energia do campo magnético, enquanto a parte imaginária está associada com dissipação de energia e geração de calor (Berkov et al., 2009; Soto-Aquino e Rinaldi, 2015). É importante notar que essas definições estão pró-

ximas aos módulos viscoelásticos G' (elástico) e G'' (viscoso) em outro contexto de fluidos complexos, como líquidos poliméricos (Bird et al., 1987). Na verdade, o componente imaginário da suscetibilidade complexa é a quantidade fundamental para examinar a hipertermia magnética (Soto-Aquino e Rinaldi, 2015). Em frequências mais baixas, a escala de tempo do campo magnético é geralmente comparável ao tempo efetivo que as partículas levam para relaxar. Portanto, a resposta de magnetização está em fase com o campo magnético oscilatório. À medida que a frequência do campo aumenta, o tempo característico do campo magnético é, geralmente, mais rápido que o tempo de relaxamento das partículas, e a magnetização não está mais em fase com o comportamento oscilatório do campo magnético (Ludwig et al., 2017).

Para melhora dos efeitos em magnetohipertermia, Kappiyoor et al. (2010) examinaram seis tipos de materiais candidatos ao uso. Os resultados do aquecimento produzidos pelas nanopartículas, indicaram que nanopartículas de ferrita de bário e ferrita de cobalto são incapazes de produzir um aquecimento suficiente para aplicação em magnetohipertermia. Porém, para o ferro-cobalto ocorreu um rápido aumento da taxa de temperatura tornando-se inseguro sua aplicação. As pesquisas mostraram que nanopartículas de magnetita, maguemita e ferro-platina foram capazes de produzir aquecimentos estáveis e de maior controle, mostrando-se adequadas para aplicações, tornando possível o aquecimento de tumores acima de 42° C, enquanto mantêm a temperatura do tecido saudável circundante abaixo desse valor. Nanopartículas de óxido de ferro superparamagnéticas foram exploradas por Laurent et al. (2011). Segundo os autores uma distribuição não homogênea de partículas no tecido pode levar à ocorrência de pontos quentes devido a alta temperatura provocando necrose do tecido. O controle preciso das propriedades físico-químicas desses sistemas magnéticos é crucial para aplicações de hipertermia, pois o calor induzido é altamente dependente dessas propriedades (Yasemian et al., 2019; Das et al., 2019)

Propriedades magnéticas e hipertérmicas de nanopartículas de ferro foram estudadas por Mehdaoui et al. (2010) e os resultados comparados e discutidos com a teoria da resposta linear. As medições de hipertermia foram realizadas em um campo magnético alternado em frequências entre 5 e 300 kHz. As nanopartículas de ferro não apresentaram propriedades maximizadora de hipertermia magnética. Apostolov et al. (2011) utilizaram-se de um modelo Hamiltoniano com uma técnica de função de Green, para estudos de diferentes

nanopartículas em nível microscópico, para uma melhor aplicação na magnetohipertermia, utilizando diferentes ferritas. As diferentes amostras dependentes da composição e tamanho de partículas foram investigadas através de análises de suas temperaturas de transição de fase e campo coercitivo, com variação da temperatura para obtenção de um valor ideal necessário na hipertermia magnética.

Com intuito de compreender o mecanismo de aquecimento, e assim, produzir partículas com um tamanho ótimo para aplicação em hipertermia magnética, Roca et al. (2012) realizaram estudos sobre a taxa de aquecimento em três conjuntos de nanopartículas de magnetita e maghemita com diâmetros de 5, 28 e 45 nm. O aumento significativo no aquecimento para as partículas de 45 nm sugere, segundo os autores, que possa estar associado com a rotação das partículas. As nanopartículas de 5 nm não resultaram em aquecimento significativo, quando o tempo de relaxação de Néel é o mecanismo dominante para o aquecimento. Para partículas de 28 nm, o aquecimento é dominado pelo tempo de relaxação browniano. Verde et al. (2012) exploraram o papel da anisotropia magnética de nanopartículas de ferrita de cobalto com diâmetros variando entre 3 a 14 nm. As investigações de hipertermia magnética foram realizadas a 500 kHz com uma amplitude de campo magnético senoidal de até 5.4 k Am^{-1} . Os parâmetros magnéticos foram extraídos de dados da magnetização estática, que mostraram que tanto a magnetização de saturação como a coercividade aumentam com a expansão do tamanho de partícula. Nemala et al. (2014) investigaram a magnetohipertermia dependente da temperatura em fluidos magnéticos, constituída por nanopartículas de Fe_3O_4 superparamagnéticas revestidas com dextrano, submetidas a campos magnéticos oscilatórios externos de várias frequências e amplitudes. O valor da potência específica dissipada (SLP - *Specific Loss Power*), reduziu com o aumento da temperatura. O SLP é definido como a potência térmica dissipada por unidade de massa de material ativo na presença de um campo magnético oscilatório e também quantifica a eficiência de aquecimento de fluidos e materiais magnéticos (Branquinho et al., 2013)

Outros estudos realizados com partículas de óxido de ferro, por meio de experimentações e simulações, para aplicação em magnetohipertermia, foram apresentados por Murase et al. (2011). As nanopartículas magnéticas foram injetadas diretamente no tecido tumoral. Através de uma função de densidade de probabilidade da distribuição do tamanho das partículas com base na distribuição log-normal, os autores computaram, mediante as simulações, a

taxa de dissipação de energia e a taxa de aumento de temperatura $\Delta\theta/\Delta t$, mostrando uma dependência da frequência e tamanho das partículas. Os valores ótimos atingidos se apresentaram para partículas com diâmetros de aproximadamente 24 nm. Dessa forma, existe um tamanho ótimo de nanopartículas para dissipação de calor (Gangwar et al., 2019; Kusigerski et al., 2019). Deatsch e Evans (2014) estudaram a influência dos comportamentos coletivos das nanopartículas em suspensão, avaliando o efeito da concentração de nanopartículas na eficiência de aquecimento. A partir de estudos experimentais, surgiram uma forte tendência de indicação que o aumento da concentração de partículas leve uniformemente a uma diminuição do tempo de relaxação magnética.

Wu e Wang (2017) investigaram a força e a frequência ótimas do campo magnético oscilatório para uma suspensão de nanopartículas de magnetita, com a finalidade de aplicação em procedimentos de tratamentos por meio da magnetohipertemia. As nanopartículas magnéticas monodispersas formaram agregados em regiões alvo em que é previsto um ambiente magneticamente e interativamente forte. Yoshida et al. (2017) exploraram o efeito do alinhamento do eixo fácil na magnetização dinâmica de nanopartículas imobilizadas e expostas a um campo magnético oscilatório. As simulações numéricas foram realizadas baseadas em uma equação de Fokker-Planck, na qual as distribuições de probabilidade para as direções de eixo fácil são levadas em consideração na simulação das amostras de nanopartículas preparadas, obtendo um bom resultado quantitativo entre experimentos e simulações. Já Miaskowski e Sawicki (2013) apresentaram uma nova investigação complementar de tratamento com hipertermia magnética baseada tanto nas experiências quanto na metodologia numérica para análise do fenômeno do aquecimento de partículas magnéticas. Os resultados obtidos à partir da calibração dos parâmetros foram aplicados em simulações numéricas, computadas com base no método de elementos finitos, levando em conta os efeitos físicos, como calor metabólico e resfriamento da pele por convecção. Outros resultados de experimento por meio, da susceptibilidade complexa do fluido magnético foram apresentados por Shokuhfar e Afghahi (2013). Com uma boa estabilidade das nanopartículas $FeCo$ para uma fração volumétrica muito baixa. Porém após aumentar o tamanho e a concentração das nanopartículas, a estabilidade do fluido magnético diminui devido à interação magnética e à consequente agregação de nanopartículas.

Simulações de partículas magnéticas injetadas em um tecido maligno e posteriormente

submetidas a um campo magnético oscilatório foram realizadas por Astefanoaei et al. (2014). A evolução da temperatura em tecidos saudáveis e tumorais foram obtidas por meio de simulações, utilizando o método de elementos finitos em um modelo termo-fluido. Sadat et al. (2014) estudaram o efeito de nanopartículas de óxido de ferro (Fe_3O_4) sobre a relaxação magnética, medindo o comportamento de aquecimento em campos magnéticos alternados de alta frequência. Conde-Leborán et al. (2015) estudaram sistematicamente as propriedades de aquecimento de um sistema de nanopartículas magnéticas com comportamento do tipo ferromagnético, distribuídas aleatoriamente no espaço. Em seus resultados mostraram que a colinearidade dos eixos fáceis marcam um limite para a dissipação de calor em baixas condições de interações dipolares. Marin et al. (2015) apresentaram um modelo teórico para a determinação do calor específico efetivo de um fluido magnético. Com este modelo, avaliaram diferentes aproximações do calor específico efetivo de um fluido magnético, à base de água com partículas de magnetita, sugerindo uma equação prática para o cálculo da taxa efetiva de aquecimento de fluidos magnéticos.

Astefanoaei et al. (2016) analisaram os efeitos hipertérmicos gerados pelas partículas magnéticas com baixa temperatura de Curie, dentro de uma configuração tumoral e submetidas a um campo magnético oscilatório. A distribuição espacial das partículas e o campo de temperatura foi determinado pela resolução da equação de convecção-difusão em tecidos porosos. Os resultados mostraram que a distribuição espacial das partículas influencia significativamente o campo de temperatura do tumor. Coisson et al. (2016) estudaram a hipertermia magnética, em condições não-adiabáticas, por meio do desenvolvimento de um modelo termodinâmico que leva em consideração o calor trocado pela amostra com o ambiente circundante. Portanto, a taxa de absorção específica pode então ser determinada com precisão apenas a partir da medição da temperatura da amostra no estado estacionário de equilíbrio. Egolf et al. (2016) apresentaram estudos sobre magnetohipertermia, empregando nanofios rotativos magneticamente. A geração de calor é induzida por fricção fluida na camada limite dos nanofios em movimento. Um modelo cinemático de rotação de nanofios foi apresentado baseando-se em uma abordagem teórica contínua válida para números de Knudsen baixos. Kafrouni e Savadogo (2016) revisaram o progresso recente no desenvolvimento de nanopartículas magnéticas para hipertermia magnética analisando as limitações e os avanços na síntese dessas partículas abordando novas perspectivas sobre o

desenvolvimento de novos nanomateriais biocompatíveis e biofuncionais para hipertermia magnética.

Os materiais ferro-ferrimagnéticos possuem uma característica importante de apresentarem histerese. A histerese ocorre em decorrência da energia dissipada para inverter os dipolos magnéticos durante uma mudança de direção do campo magnético. A área da curva de histerese nos dá a energia dissipada em forma de calor por unidade de volume quando o material está sob ação de campo magnético (Branquinho et al., 2013). Três tipos de teorias para o cálculo das áreas de ciclos de histerese de nanopartículas magnéticas foram exploradas por Carrey et al. (2011). Um resultado importante deste estudo é que a anisotropia das nanopartículas magnéticas sistematizadas é um parâmetro importante para entender as propriedades da hipertermia magnética. Vallejo-Fernandez e O'Grady (2013) calcularam o efeito da distribuição da anisotropia no aquecimento por histerese em nanopartículas magnéticas para aplicações de hipertermia. A distribuição de constantes de anisotropia foi considerada Gaussiana e seus efeitos quantificados em termos do calor gerado por perdas de histerese.

Kita et al. (2010) realizaram simulações numéricas para nanopartículas ferromagnéticas de domínio único com simetrias magnéticas cúbicas e uniaxiais obtendo curvas de $M(H)$ juntamente com pequenos *loops* formando ciclos de histerese. Para geração de calor utilizaram-se nanopartículas ferromagnéticas. Connord et al. (2014) descreveram uma configuração para medir os ciclos de histerese gerados em alta frequência de amostras magnéticas, por meio de um campo magnético alternado. Os ciclos de histerese de alta frequência foram medidos usando integração numérica de sinais. Sasayama et al. (2015) examinaram a perda de energia magnética pelas partículas por histerese. Essas perdas foram calculadas por meio de medição dos ciclos de histerese, com propósito de aplicação em magnetohipertermia. Uma simulação numérica baseada na função Langevin foi realizada para validação dos resultados experimentais. Raikher e Stepanov (2014) estudaram partículas superparamagnéticas anisotrópicas uniaxialmente suspensas em um fluido viscoso e sujeitas a um campo oscilatório. Tendo em conta as relaxações magnéticas internas (Néel) e externas (Browniana), os autores obtiveram uma expressão simples para a susceptibilidade complexa do fluido magnético.

Lahiri et al. (2016) estudaram a hipertermia induzida por campo magnético em nano-

fluidos com partículas de Fe_3O_4 revestidos com fosfato à base de água, sintetizados por um método de co-precipitação utilizando soluções de sais ferrosos e férricas, amônia e ácido ortofosfórico. Observou-se que a taxa de absorção específica inicialmente aumenta com a concentração da amostra, atinge um máximo em uma concentração ótima, e diminui com uma concentração além do ideal. Essa diminuição é atribuída ao aumento das interações dipolares e agregação de partículas, agindo para redução da susceptibilidade inicial e a área de ciclo de histerese. Coisson et al. (2017) estudaram áreas de ciclos de histerese magnética e hipertermia em nanopartículas magnéticas com o objetivo de fornecer métodos confiáveis e reproduzíveis de medição da taxa de absorção específica. Foram mensuradas as áreas de ciclos de histerese estática, áreas de ciclos de histerese dinâmicos e hipertermia de uma solução aquosa. Munoz-Menendez et al. (2017) pesquisaram o papel da polidispersidade de anisotropia das partículas em relação à amplitude do campo magnético oscilatório, usando uma técnica de Monte Carlo. Em seus resultados apontaram para um melhoramento no aquecimento global com o uso de partículas com grande anisotropia, ao passo que para conseguir um aquecimento local homogêneo mostrou-se melhor o uso de partículas de anisotropia inferior, garantindo que a maioria do sistema obtenha condições de ciclo de histerese.

O número total de pontos de injeção de fluido magnético, bem como a sua localização dentro de um tecido tumoral, desempenham um papel significativo no método de magnetohipertermia (Boroon et al., 2018). Dessa forma, a distribuição uniforme de concentração de partículas magnéticas é importante para uma distribuição homogênea de temperatura. A dependência da susceptibilidade magnética complexa de um fluido magnético à base de água com partículas de magnetita, na frequência e amplitude de campo, foram exploradas por Malaescu et al. (2018). Os resultados mostraram que o pré-aquecimento da amostra de fluido magnético permite que a temperatura da amostra seja levada a níveis de interesse para aplicações médicas, como o tratamento do câncer por hipertermia magnética de tecidos tumorais, em um tempo muito menor para pequenas amplitudes do campo magnético alternado, do que seria o caso se a amostra não fosse pré-aquecida. Abu-Bakr e Zubarev (2019) apresentou estudos teóricos sobre o aumento de temperatura produzida por um sistema de partículas ferromagnéticas com interações magnéticas, submetida a um campo magnético rotativo. Mostrou-se que as interações magnéticas entre as partículas au-

menta significativamente a intensidade da produção de calor. Assim, o efeito térmico no campo rotativo é pronunciadamente maior que o efeito no polarizado linear.

1.4 Objetivos

GERAL

O presente trabalho tem como principal objetivo o desenvolvimento de um estudo computacional sobre a influência dos efeitos das interações dipolares e interações hidrodinâmicas na susceptibilidade complexa do fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório. Predizer as taxas de aumento de temperatura obtidas em técnicas de magnetohipertermia, considerando interações magnéticas e hidrodinâmicas de longo alcance entre todas as partículas que constituem o fluido magnético. Esse estudo é particularmente importante, pois os atuais modelos teóricos são válidos apenas para fluidos magnéticos diluídos, nas quais existem teorias assintóticas capazes de prever o comportamento da magnetização de equilíbrio de um fluido magnético. Entretanto, conforme aumenta-se a fração volumétrica de partículas, as atuais teorias assintóticas não são mais capazes de prever o comportamento das propriedades de fluidos magnéticos. Portanto se faz necessário o uso de recursos computacionais para que a física em questão possa ser compreendida e controlada de modo satisfatório. Além disso, até o momento, o efeito das interações hidrodinâmicas de longo alcance tem sido negligenciado devido à sua dificuldade de implementação computacional. Nesse trabalho esses efeitos serão também considerados.

ESPECÍFICOS

1. Realizar simulações diretas de partículas magnéticas usando o método Dinâmica de Langevin para obter a evolução temporal de uma suspensão magnética, com condições de contorno periódicas, submetida a um campo magnético oscilatório do tipo senoidal. Determinar numericamente a magnetização oscilante no tempo e analisar o seu comportamento considerando vários parâmetros físicos do problema.
2. Desenvolvimento de um código numérico, que a partir de um arquivo de saída, com dados de simulações realizadas no contexto de campos magnéticos oscilatórios, seja

capaz de calcular, via integração numérica, o comportamento da susceptibilidade complexa do fluido magnético, e posteriormente a taxa de aumento da temperatura da suspensão em função do tempo. Comparar os resultados obtidos numericamente com teorias assintóticas.

3. Desenvolver um estudo computacional de como as interações hidrodinâmicas e dipolares, entre partículas magnéticas, influenciam o comportamento dos módulos da susceptibilidade complexa do fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório aplicado.
4. Estudar as áreas formadas pelas curvas de histereses obtidas por meio da magnetização, e verificar qual a influência das interações dipolares na dissipação da energia magnética na forma de calor, representada por essa área.
5. Analisar a influência do número de Peclet no comportamento das partes real e imaginária da susceptibilidade complexa, e também na taxa média de aumento de temperatura do fluido magnético.
6. Com base em simulações computacionais, prever a taxa média de aumento de temperatura e temperatura média, obtidas em técnicas de magnetohipertermia. Estudar o efeito da fração volumétrica de partículas. Examinar as interações dipolares e hidrodinâmicas no comportamento da susceptibilidade complexa e nas taxas de aumento de temperatura em função dos parâmetros físicos do problema.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, são apresentados os fundamentos teóricos importantes para o estudo de fluidos magnéticos com foco na escala da partícula. Na primeira parte, é apresentada uma relação entre a formulação macroscópica e a dinâmica microestrutural em fluidos magnéticos definindo-se o conceito de magnetização a partir da microestrutura do material. São abordados tópicos fundamentais para o desenvolvimento desta tese como, as equações de Langevin aplicada à simulação microestrutural de fluidos magnéticos e sistemas periódicos, com abordagem do método das somas de Ewald, para o cômputo de interações magnéticas periódicas.

2.1 Conexão entre a formulação Macroscópica e a Dinâmica Microestrutural em Colóides Magnéticos

A hidrodinâmica de fluidos magnéticos é uma área de pesquisa que possui grande interface entre a formulação macroscópica contínua das equações de balanço que descrevem o movimento de um fluido magnético e a dinâmica microestrutural de um fluido magnético. A magnetização de um fluido na ação de um campo externo leva ao surgimento de novos

termos na equação do movimento segundo uma abordagem Euleriana contínua. Esses novos termos dependem fortemente da modelagem do campo de magnetização do material. Entretanto, alguns termos que surgem na equação evolutiva de magnetização dependem da física que acontece na microescala. Essa seção pretende definir o conceito de magnetização à partir da microestrutura do material.

A magnetização na escala macroscópica mede o estado de polarização de um meio contínuo magnetizado. Nesta seção, será definido o conceito de momento de dipolo magnético ou momento magnético, como uma propriedade advinda de mecanismos em escalas nanoscópicas, de uma partícula em uma suspensão coloidal magnética e sua relação com a magnetização de um meio, como uma propriedade macroscópica. A caracterização do momento de dipolo e magnetização, será obtida de acordo com o desenvolvimento apresentado por Cunha (2012).

A definição do momento de dipolo magnético \mathbf{m} medido em joules por tesla (JT^{-1}) ou em ampère metro quadrado (Am^2), pode ser feita, considerando um circuito fechado de pequena área transversal ΔA , com um fluxo de corrente elétrica I constante. Por definição, o momento de dipolo magnético associado a este circuito, é dado por

$$\mathbf{m} = I\Delta A\mathbf{n}, \quad (2.1)$$

no qual \mathbf{n} é o vetor unitário normal a ΔA , definido pelo sentido da corrente elétrica. Sejam os momentos de dipolos distribuídos de forma estatisticamente homogêneo e independentes no volume material δV , formado por um número suficientemente grande de partículas magnéticas, dessa forma o cálculo da média dos momentos de dipolos contidos em δV possui variações muito pequenas na escala local ΔV . Assim, pela hipótese de ergodicidade, a média volumétrica dos momentos de dipolos é equivalente a média de distribuição de probabilidade associada aos momentos de dipolo magnéticos das partículas contidas em δV . Deste modo, define-se a média volumétrica dos momentos magnéticos distribuídos em δV , como

$$\langle \mathbf{m} \rangle (\mathbf{x}, t) = \lim_{\delta V' \rightarrow \delta V} \frac{1}{\delta V'} \int_{\delta V'} \mathbf{m}(\mathbf{y}, t) dV, \quad (2.2)$$

em que \mathbf{x} é uma posição fixa no interior do volume material δV , no qual em seu entorno é calculado a propriedade média local e \mathbf{y} percorre o interior do volume infinitesimal, podendo estar no domínio do fluido base contínuo ou no domínio das partículas (figura 2.1). Como

se trata de uma média volumétrica, para um tempo t fixo ou em regime permanente, a dependência do tempo nos termos não será explicitada.

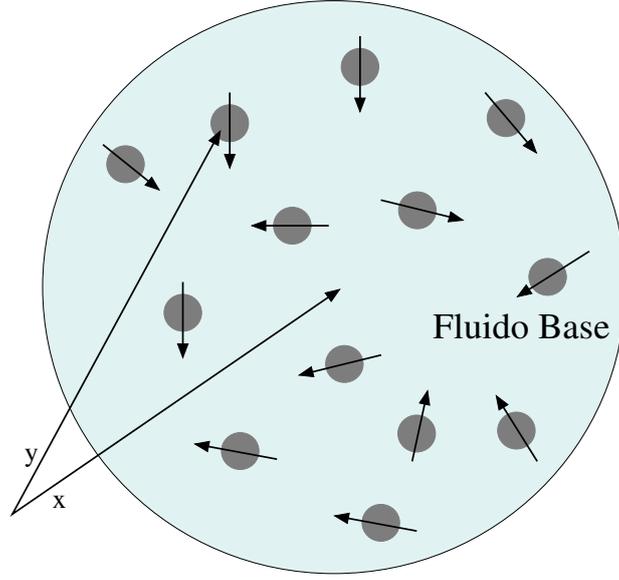


Figura 2.1: Representação esquemática de um volume contínuo δV de uma suspensão magnética, em que \mathbf{x} é uma posição fixa no interior do volume material contínuo, no qual em seu entorno é calculado a propriedade média local e \mathbf{y} percorre o interior do volume infinitesimal assinalando onde há partículas.

Decompondo o volume δV como a soma do volume do fluido base e volume das partículas magnéticas, tem-se que

$$\delta V = \delta V_m + \sum_k^N v_p^k, \quad (2.3)$$

com δV_m sendo o volume do fluido, N é o número total de partículas magnéticas contidas em δV e v_p é o volume de uma partícula. Dessa forma, a equação (2.2) pode ser escrita, como

$$\langle \mathbf{m} \rangle (\mathbf{x}, t) = \lim_{\delta V' \rightarrow \delta V} \frac{1}{\delta V'} \left[\int_{\delta V_m} \mathbf{m}(\mathbf{y}) dV + \int_{\sum_k^N v_p^k} \mathbf{m}(\mathbf{y}) dV \right]. \quad (2.4)$$

Agora observe que $\mathbf{m}(\mathbf{y}) = 0$ se $\mathbf{y} \in \delta V_m$, pois o fluido base não se polariza, assim a integral de volume em δV_m é nula. Tem-se então que

$$\langle \mathbf{m} \rangle (\mathbf{x}, t) = \lim_{\delta V' \rightarrow \delta V} \frac{1}{\delta V'} \int_{\sum_k^N v_p^k} \mathbf{m}(\mathbf{y}) dV. \quad (2.5)$$

A equação (2.5) representa uma média volumétrica de todos os momentos de dipolo magnéticos orientados na direção do campo magnético aplicado. A magnetização na escala do contínuo, representa o efeito médio das componentes dos momentos de dipolo magnéticos na direção do campo magnético aplicado, dessa forma, para fluidos magnéticos, o vetor magnetização \mathbf{M} , pode ser visto como uma medida global do grau de alinhamento de momentos magnéticos com o campo externo aplicado. Considerando uma suspensão monodispersa com N partículas de volume v_p e aproximando a equação (2.5) por sua representação discreta, obtém-se que

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \left(\frac{1}{\delta V} \right) \sum_{k=1}^N \mathbf{m}^k v_p^k = v_p \left(\frac{N}{\delta V} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{m}^k \right), \quad (2.6)$$

em que a média dos momentos de dipolo magnéticos é definida por

$$\overline{\mathbf{m}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{m}^k, \quad (2.7)$$

e o número de densidade de partículas, como

$$n = \frac{N}{\delta V}. \quad (2.8)$$

Substituindo a equação (2.7) e (2.8) em (2.6), obtém-se que

$$\langle \mathbf{m} \rangle = v_p n \overline{\mathbf{m}} = \phi \overline{\mathbf{m}}, \quad (2.9)$$

em que $\phi = nv_p$ é a fração volumétrica de partículas em δV . Assim, a magnetização \mathbf{M} , sendo uma média volumétrica de momentos magnéticos na direção do campo aplicado por unidade de volume da partícula, é dada por

$$\mathbf{M} = \frac{\langle \mathbf{m} \rangle}{v_p} = n \overline{\mathbf{m}}. \quad (2.10)$$

Portanto, a magnetização \mathbf{M} é uma média volumétrica de momentos magnéticos na direção do campo aplicado \mathbf{H} por unidade de volume da partícula. Quando os momentos de dipolo magnético da suspensão estão completamente orientados na direção do campo magnético aplicado, a magnetização do meio atinge seu valor máximo, denominado magnetização de saturação denotada por \mathbf{M}_s .

Um outro exemplo, da conexão entre a formulação macroscópica e a dinâmica microestrutural em fluidos particulados, foi apresentado por Batchelor (1967) e Landau (1959) através de um modelo que visa buscar uma equação constitutiva para o tensor de tensões de um fluido com partículas. Partindo de uma média estatística na escala das partículas, verificou-se que existe uma contribuição destas no tensor de tensões do material como um todo, mostrando-se dessa forma, que existe um acoplamento entre fenômenos na microestrutura (escala das partículas) e respostas macroscópicas contínuas do fluido particulado.

2.2 Uma breve Discussão sobre as Forças de Interação Fluido-Partícula para uma Partícula Isolada

Fundamentado no trabalho de Sobral et al. (2007) será feito uma breve discussão sobre as forças fluido-partícula, para uma partícula isolada. Através da investigação temporal do movimento da partícula em relação ao estado estacionário, os autores determinaram as forças relevantes que atuam sobre a partícula e as fases importante de seu movimento, sendo algumas dessas forças encontradas por meio da análise de escala da equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis.

A equação de Navier-Stokes, que descreve o movimento de um fluido incompressível é dada por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.11)$$

em que η é a viscosidade do fluido e ρ sua massa específica. Adimensionalizando a equação (2.11) através da escala típica de tempo l_0/u_0 , em que l_0 representa um comprimento característico do escoamento e u_0 velocidade típica da partícula, dessa forma, segue-se que

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Fr} \mathbf{g}, \quad (2.12)$$

em que $Re = \rho u_0 l_0 / \eta$ é o número de Reynolds, que expressa a magnitude das forças de inércia em relação às forças viscosas e $Fr = u_0^2 / g l_0$ é o número de Froude. Para um escoamento em baixo número de Reynolds, balanceando a pressão e os termos viscosos, observa-se por meio de análise de escala, que existe uma força de arrasto f_s atuante na partícula devido ao escoamento induzido, que escala como $f_s \sim \eta l_0 u_0$. Deste modo para o

escoamento em baixo número de Reynolds, isto é $Re \ll 1$, induzido pelo movimento de uma única partícula, a força de arrasto pode ser obtida a partir da solução analítica da equação (2.11), quando o termo de inércia do escoamento é completamente desprezado e somente a difusão viscosa governa o movimento do fluido. Essa expressão conhecida como, solução de Stokes para a força de arrasto viscoso do escoamento passando por uma esfera, é dado por

$$\mathbf{f}_s = 6\pi\eta a \mathbf{v}. \quad (2.13)$$

Balanceando o termo inercial não linear $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ com o termo da pressão, obtemos uma força \mathbf{f}_o que escala como $f_o \sim \rho l_0^2 u_0^2$, sendo uma escala típica para a força atuante em uma partícula fluida devido a inércia do fluido, considerada não linear em termos da velocidade da partícula e mais fortemente dependente da geometria do corpo, já que escala com l_0^2 . Realizando um balanço entre o termo inercial transiente e o gradiente de pressão, verifica-se que uma força que escala como $f_{mv} \sim \rho l_0^3 u_0 / \tau_p$ dependente de uma escala de tempo τ_p típica do movimento da partícula. A expressão para força \mathbf{f}_o foi determinada analiticamente por Oseen (1910), para condições de número de Reynolds $\mathcal{O}(1)$, dada por

$$\mathbf{f}_o = \frac{9}{4} \pi a^2 \rho |\mathbf{v}| \mathbf{v}. \quad (2.14)$$

A solução do escoamento potencial em torno de uma esfera (Batchelor, 1967) leva à determinação da força transiente de massa virtual \mathbf{f}_{mv} , também chamada de arrasto de massa virtual, dada por

$$\mathbf{f}_{mv} = \frac{2}{3} \pi a^3 \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (2.15)$$

Basset (1888) determinou uma solução analítica da equação (2.11), para o caso em que o termo de inércia não linear $\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ é desprezado. Essa força de arrasto transiente surge devido à interação fluido partícula e pode ser calculada por meio da transformada de Fourier ou harmônicos esféricos. Sua expressão é dada pela seguinte integral de convolução

$$\mathbf{f}_b = 6a^2 \sqrt{\pi \rho \eta} \int_0^t \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} \right)_{t=\zeta} \frac{1}{\sqrt{t-\zeta}} d\zeta. \quad (2.16)$$

Além dessas forças hidrodinâmicas discutidas anteriormente, a partícula ainda esta sujeita a uma força correspondente ao seu peso líquido, conhecida por força de empuxo líquido

gravitacional, responsável por conduzir o movimento da partícula levando ao processo de sedimentação, dada por

$$\mathbf{f}_g = \frac{4\pi a^3}{3} \Delta\rho \mathbf{g}. \quad (2.17)$$

Por meio da segunda lei de Newton, a equação do movimento de uma partícula isolada e imersa em um fluido viscoso é dada por

$$\sum \mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}, \quad (2.18)$$

em que \mathbf{F} indica as forças que estão agindo sobre a partícula, m é a massa da partícula e $d\mathbf{v}/dt$ sua aceleração. Portanto, substituindo essas forças na equação (2.18), a equação de movimento de uma partícula esférica, isolada e imersa em um fluido viscoso, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} m \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= 6\pi\eta a \mathbf{v} + \frac{9}{4}\pi a^2 \rho |\mathbf{v}| \mathbf{v} + \frac{2}{3}\pi a^3 \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{4\pi a^3}{3} \Delta\rho \mathbf{g} \\ &+ 6a^2 \sqrt{\pi\rho\eta} \int_0^t \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} \right)_{t=\zeta} \frac{1}{\sqrt{t-\zeta}} d\zeta. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Sobral et al. (2007) analisaram as forças hidrodinâmicas da equação (2.19), que atuam sobre a partícula imersa em um fluido. Foi verificado que conforme a razão de massa específica ρ_p/ρ_f aumenta, em que ρ_f representa a massa específica do fluido e ρ_p denota a massa específica da partícula, o arrasto de Stokes passa a dominar proporcionalmente as forças transientes de Oseen (1910), arrasto virtual e Basset(1888).

Considerando que partículas magnéticas se movimentam em regimes de baixos números de Reynolds, qualquer efeito de inércia do fluido será desprezado neste trabalho, tomando-se somente o arrasto de Stokes, e desprezando os termos associados ao arrasto de Basset, Oseen e massa virtual. Uma observação importante é que esses resultados são válidos para uma partícula isolada. Já para um sistema com muitos corpos, a interação hidrodinâmica entre partículas é um mecanismo muito importante, devido a perturbação da partícula no fluido, resultando em uma redistribuição de tensões viscosas nas superfícies de outras partículas que estejam suspensas, influenciando os seus movimentos. Esse mecanismo é ainda mais significativo em regimes de baixos Reynolds.

2.3 Características do Movimento Browniano

O movimento browniano, observado primeiramente pelo botânico Robert Brow em 1827, se trata do movimento caótico de micropartículas suspensas em um fluido, cujo tamanho pode variar entre 1 nm a $10\mu\text{m}$. Um estudo formal metuculoso do movimento browniano foi realizado por Einsten (1905), mostrando em seu trabalho que o movimento browniano é causado por diversas colisões de moléculas do fluido, devido ao movimento incessante aleatório (movimento térmico) sobre partículas imersas de tamanho sub-micrométrico. O movimento browniano de uma partícula imersa em um fluido, ocorre sob a ação de duas forças, sendo uma força aleatória causada por colisões moleculares e uma força sistemática causada por atrito viscoso. Devido a enorme quantidade de colisões moleculares, mesmo que as partículas sejam maiores que estas moléculas, elas estão sujeitas ao movimento browniano.

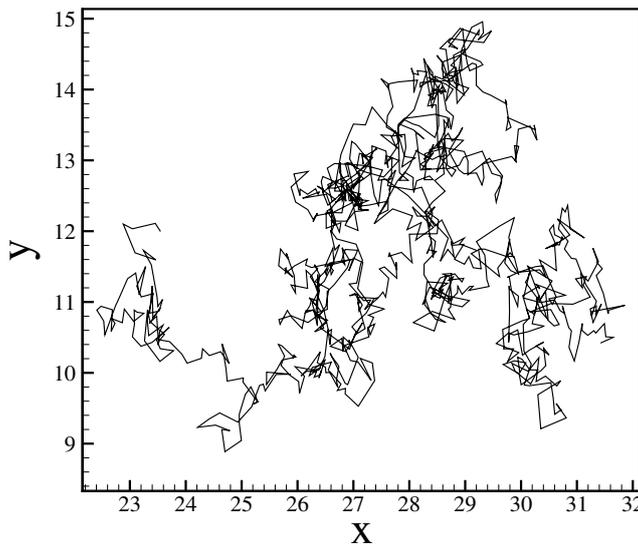


Figura 2.2: Trajetória de uma partícula em movimento browniano.

Em 1905, Einstein obteve uma expressão para o deslocamento quadrático médio de uma partícula sujeita ao movimento browniano dada por

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt, \quad (2.20)$$

em que x^2 representa o deslocamento de uma partícula em certa direção elevado ao quadrado, \mathcal{D} é o coeficiente de difusão browniano, também conhecido por coeficiente de difusão

Stokes-Einstein e t denota o tempo de experimento. A idéia baseia-se em supor que as partículas executam movimentos independentes e que os movimentos da mesma partícula em diferentes intervalos de tempos também sejam processos mutualmente independentes ou temporalmente descorrelacionados. Portanto, uma forma eficiente de se estudar o movimento browniano consiste na análise da variância do deslocamento da partícula.

2.4 Equação Diferencial Estocástica de Langevin

O movimento browniano de uma partícula nanométrica suspensa em um líquido, pode ser descrito pela equação estocástica de Langevin. No modelo estocástico de Langevin, a partícula browniana evolui de acordo com a segunda lei de Newton, e sua velocidade $\mathbf{u}(t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ é governada por

$$\frac{d\mathbf{x}^2}{dt} + \zeta \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{f}_b(t)}{m}, \quad (2.21)$$

representando respectivamente, as contribuições devido a inércia, o arrasto viscoso e a força browniana, \mathbf{x} denota a posição do centro da partícula esférica de massa $m = 4\pi a^3 \rho / 3$, $\zeta = 6\pi\eta a / m$ é o inverso do tempo de relaxação da partícula avaliada e $\mathbf{f}_b(t)$ é o termo de força randômica com escalas de tempo características do movimento molecular. A solução para equação (2.21), pode ser obtida aplicando o método do fator integrante. Deste modo, multiplicando esta equação pelo fator integrante $e^{\zeta t}$, chamando a variável t de α , e observando que $\mathbf{u}(t) = d\mathbf{x}/dt$, tem-se que

$$\frac{d}{d\alpha}(e^{\zeta\alpha}\mathbf{u}) = \frac{e^{\zeta\alpha}}{m}\mathbf{f}_b(\alpha). \quad (2.22)$$

Integrando em α , com variação de 0 até t na equação (2.22), considerando que $u(0) = 0$, a expressão da solução é dada por

$$\mathbf{u}(t) = \frac{e^{-\zeta t}}{m} \int_0^t e^{\zeta\alpha} \mathbf{f}_b(\alpha) d\alpha. \quad (2.23)$$

Na solução (2.23) fornecida para saber a velocidade de uma partícula browniana no tempo t , é preciso conhecer todo o histórico das forças brownianas que atuaram em cima desta. Esta solução, considera a existência de duas escalas de tempo distintas, uma associada ao movimento da partícula no instante t e outra associada à velocidade das flutuações correspondente ao movimento molecular.

2.5 Modelagem de Forças e Torques Brownianos

Dois hipóteses caracterizam a força randômica $\mathbf{f}_b(t)$. Primeiro, as forças brownianas são consideradas aleatórias em direção e magnitude, assim $\mathbf{f}_b(t)$ é um vetor randômico com característica isotrópica, e a segunda, a não correlação na escala temporal do movimento da partícula. Desta forma, conforme estas hipóteses, o movimento browniano é caracterizado por um sinal aleatório no tempo conhecido como ruído branco. Estas condições podem ser expressas matematicamente por

$$\langle \mathbf{f}_b(t) \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{f}_b(t) \mathbf{f}_b(t') \rangle = \mathbf{F} \delta(t - t'), \quad (2.24)$$

em que $\delta(t - t')$ é a função delta de Dirac, \mathbf{F} é um tensor de segunda ordem associado à intensidade das forças Brownianas. Para determinação da autocorrelação de velocidade de uma partícula sujeita ao movimento browniano, aplica-se previamente uma média de realizações na equação (2.23). Dessa maneira obtém-se que

$$\langle \mathbf{u}(t) \rangle = \frac{e^{-\zeta t}}{m} \int_0^t e^{\zeta \alpha} \langle \mathbf{f}_b(\alpha) \rangle d\alpha, \quad (2.25)$$

em sequência, tomando a média de realizações no tensor $\mathbf{u}(t)\mathbf{u}(t')$ e aplicando a condição de ruído branco, equação (2.24), tem-se que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}(t)\mathbf{u}(t') \rangle &= \frac{e^{-\zeta(t+t')}}{m^2} \int_0^{t'} \int_0^t e^{\zeta(\alpha+\alpha')} \langle \mathbf{f}_b(\alpha) \mathbf{f}_b(\alpha') \rangle d\alpha d\alpha' \\ &= \frac{e^{-\zeta(t+t')}}{m^2} \int_0^{t'} \int_0^t e^{\zeta(\alpha+\alpha')} \mathbf{F} \delta(\alpha - \alpha') d\alpha d\alpha'. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Considere agora o seguinte resultado devido a propriedade da função de Dirac

$$\int_0^t e^{\zeta(\alpha+\alpha')} \mathbf{F} \delta(\alpha - \alpha') d\alpha = \mathbf{F} e^{2\alpha'\zeta}, \quad (2.27)$$

utilizando a equação (2.27) em (2.26) e após o cálculo da integral, obtém-se a seguinte expressão para função de autocorrelação das velocidades

$$\mathbf{R}(t - t') = \langle \mathbf{u}(t)\mathbf{u}(t') \rangle = e^{-\zeta(t-t')} \frac{\mathbf{F}}{12m\pi\eta a}, \quad (2.28)$$

em que $t - t'$ é um intervalo no qual $\mathbf{f}_b(t)$ sofre muitas flutuações, mas é curto o suficiente para que $\mathbf{u}(t)$ não varie de forma significativa, o que representa a condição de regime de Stokes quase-permanente. Observe que a autocorrelação apresenta uma característica de processo estacionário por depender apenas de $t - t'$.

De acordo com Batchelor (1976), a energia cinética de partículas é dividida igualmente entre os três modos de translação, assim a partir do teorema da equipartição de energia, a expressão em termos matemático é dada por

$$\frac{m}{2} \langle \mathbf{u}(t) \mathbf{u}(t') \rangle = \frac{k_B T}{2} \mathbf{I}, \quad (2.29)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta do fluido. Comparando as equações 2.28 e 2.29 para $t - t' = 0$, obtém-se

$$\mathbf{F} = 12\pi\eta a k_B T \mathbf{I}. \quad (2.30)$$

A equação (2.30) relaciona a intensidade da força browniana com as forças de fricção que dissipa a energia das flutuações. Ambas se originam da interação entre a partícula e o fluido ambiente, mas diferem substancialmente nas escalas de tempo (Russel et al. 1989). Pode-se concluir que a força browniana escala com o raio da partícula, enquanto a força peso escala com o raio elevado ao cubo, explicando porque agregados com mais partículas são dominados pelo processo de sedimentação diferencial, enquanto agregados menores estão sujeitos ao movimento browniano (Gontijo, 2013). Como a observação de processos na escala de tempo de nanosegundo é difícil, a principal consequência observável no movimento browniano é o deslocamento em vez de velocidade. Substituindo a equação (2.30) em (2.24) e posteriormente tomando o traço, obtém-se o teorema da Flutuação-Dissipação, dado em termos matemáticos por

$$\langle \mathbf{f}_b(t) \cdot \mathbf{f}_b(t') \rangle = 12\pi\eta a k_B T 3\delta(t - t') = (6\pi\eta a)(6k_B T)\delta(t - t'), \quad (2.31)$$

em que o termo $6\pi\eta a$ é responsável pela dissipação de energia do sistema, ao passo que o termo $6k_B T$ está associado à agitação térmica do fluido, induzindo flutuações de velocidade na partícula avaliada. Por meio da equação (2.31), pode-se inferir uma magnitude típica (módulo) para o vetor força randômica $\mathbf{f}_b(t)$ na sua forma dimensional. Note que

$$|\mathbf{f}_b| = \sqrt{\langle \mathbf{f}_b(t) \cdot \mathbf{f}_b(t') \rangle} = \sqrt{\frac{(6k_B T)(6\pi\eta a)}{\delta\tau}} = 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}_t}{\delta\tau} \right)^{1/2}, \quad (2.32)$$

em que o termo $\delta\tau = 1/\delta(t-t')$ é um tempo associado ao impulso do movimento browniano e

$$\mathcal{D}_t = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}, \quad (2.33)$$

é o coeficiente de difusão browniano de Stokes-Einstein para movimento translacional. Dessa forma, a força browniana é dada por

$$\mathbf{f}_b(t) = 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}_t}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (2.34)$$

em que $\boldsymbol{\xi}$ é o vetor randômico que apresenta uma distribuição uniforme $[-1, 1]$. O torque browniano também é representado por uma distribuição gaussiana de média zero e variância finita, obtida de forma análoga a força browniana, a partir do teorema da equipartição de energia. Portanto, tem-se que

$$\langle \mathbf{T}_b(t) \rangle = \mathbf{0}, \quad \langle \mathbf{T}_b(t) \mathbf{T}_b(t') \rangle = 2\pi\eta 8a^3 k_B T \mathbf{I} \delta(t-t'). \quad (2.35)$$

Aplicando o traço na segunda equação de (2.35), obtém-se que

$$\langle \mathbf{T}_b(t) \cdot \mathbf{T}_b(t') \rangle = (8\pi\eta a^3)(6k_B T) \delta(t-t'). \quad (2.36)$$

Dessa forma, segue-se que

$$|\mathbf{T}_b| = \sqrt{\langle \mathbf{T}_b(t) \cdot \mathbf{T}_b(t') \rangle} = \sqrt{\frac{(6k_B T)(8\pi\eta a^3)}{\delta\tau}} = 8\pi\eta a^3 \left(\frac{6\mathcal{D}_r}{\delta\tau} \right)^{1/2}. \quad (2.37)$$

Segue-se que o torque browniano é dado por

$$\mathbf{T}_b = 8\pi\eta a^3 \left(\frac{6\mathcal{D}_r}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (2.38)$$

em que \mathcal{D}_r é o coeficiente de difusão browniano de Stokes-Einstein para o movimento rotacional, expresso como

$$\mathcal{D}_r = \frac{k_B T}{8\pi\eta a^3}. \quad (2.39)$$

2.6 Forças e Torques Magnéticos

Forças e torques magnéticos atuam em uma partícula, ou dipolo magnético, devido a interação entre partícula-campo ou partícula-partícula. Para calcular a força magnética,

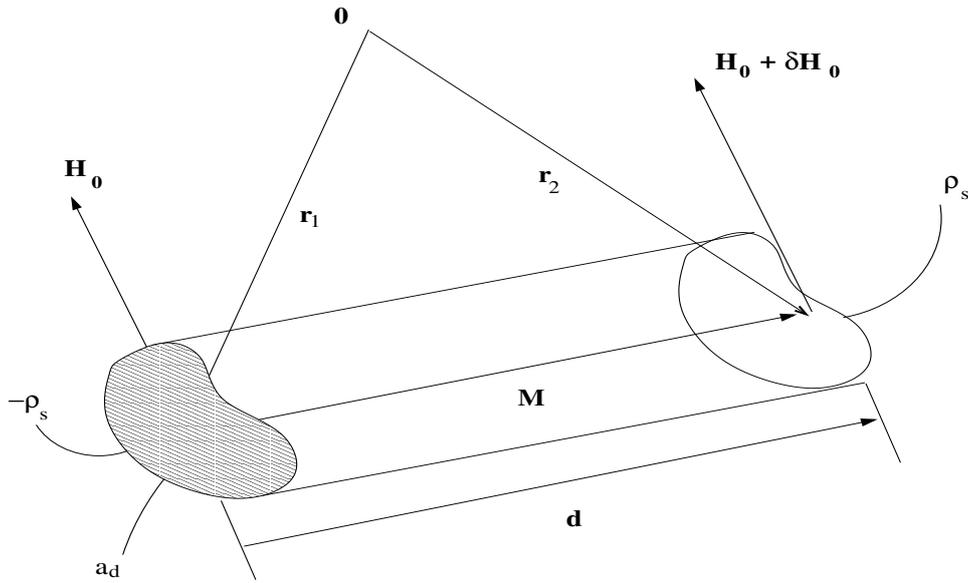


Figura 2.3: Forças magnéticas devido a aplicação de um campo magnético em um pequeno elemento de substância magnética polarizada (Gontijo, 2013).

considere um pequeno corpo magnetizado devido a aplicação de um campo magnético externo conforme a figura (2.3).

Essa figura representa um pequeno elemento cilíndrico de uma substância polarizada magneticamente, no qual o vetor magnetização \mathbf{M} encontra-se alinhado com o eixo geométrico na direção \mathbf{d} . Sobre esse material, atua um campo magnético externo \mathbf{H}_0 , e polos de densidades $\rho_s = \mu_0 M$ surgem em mesmas quantidades e com polaridades invertidas nas áreas laterais a_d . Observa-se também que o volume da partícula é dado por $\delta V = a_d d$. O campo magnético externo aplicado pode ser interpretado como uma força magnética por polo magnético, dessa forma, a força que atua sobre o elemento devido ao campo magnético externo é dada por

$$\mathbf{f}_m^h = -\mathbf{H}_0 \rho_s a_d + (\mathbf{H} + \delta \mathbf{H}_0) \rho_s a_d = \delta \mathbf{H}_0 \rho_s a_d, \quad (2.40)$$

em que $\delta \mathbf{H}_0$ é a variação de \mathbf{H}_0 ao longo da direção \mathbf{d} . Aplicando a série de Taylor, para uma aproximação de primeira ordem em $\delta \mathbf{H}_0$, obtém-se que

$$\delta \mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0(\mathbf{x} + \mathbf{d}) - \mathbf{H}_0(\mathbf{x}) = (\mathbf{d} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0. \quad (2.41)$$

Como \mathbf{d} e \mathbf{M} são paralelos, pode-se escrever $\mathbf{d} = d \frac{\mathbf{M}}{M}$, em que d é a magnitude de \mathbf{d} . Assim o termo $\delta \mathbf{H}_0$ pode ser expresso como

$$\delta \mathbf{H}_0 = (\mathbf{d} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 = \frac{d}{M} (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0, \quad (2.42)$$

substituindo a equação (2.42) em (2.40), tem-se que

$$\mathbf{f}_m^h = \delta \mathbf{H}_0 \rho_s a_d = \frac{d}{M} (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 (\rho_s a_d). \quad (2.43)$$

Dividindo a equação (2.43) por $\delta V = a_d d$ e observando que $\frac{\rho_s}{M} = \mu_0$, tem-se que a força por unidade de volume que atua sobre o elemento é dada por

$$\frac{\mathbf{f}_m^h}{\delta V} = \mu_0 (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0. \quad (2.44)$$

A partir da figura (2.3), podemos também deduzir o torque magnético que age sobre o elemento magnetizado. Considere d pequeno, de tal forma que o campo magnético aplicado seja uniforme espacialmente, de modo que $\delta \mathbf{H}_0 = 0$. Segue-se que o torque é dado por

$$\mathbf{T}_m^h = \rho_s a_d (-\mathbf{r}_1 \times \mathbf{H}_0 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{H}_0) = \rho_s a_d (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \mathbf{H}_0, \quad (2.45)$$

observe que da figura (2.3), tem-se que $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{d}$, assim $\mathbf{d} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$. Substituindo esse resultado em (2.45), tem-se que

$$\mathbf{T}_m^h = \rho_s a_d \mathbf{d} \times \mathbf{H}_0, \quad (2.46)$$

como $\rho_s a_d \mathbf{d} = \mu_0 \mathbf{M} \delta V$, segue-se que

$$\frac{\mathbf{T}_m^h}{\delta V} = \mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H}_0, \quad (2.47)$$

ou também

$$\mathbf{T}_m^h = \mu_0 \mathbf{m} \times \mathbf{H}_0, \quad (2.48)$$

e portanto, devido ao desalinhamento entre o vetor magnetização e o campo magnético, o elemento encontra-se na presença de torques magnéticos.

2.7 Iteração Dipolar

Para calcular o potencial de interação entre momentos de dipolos magnéticos, considere a figura (2.4), em que \mathbf{d} representa a orientação do momento de dipolo.

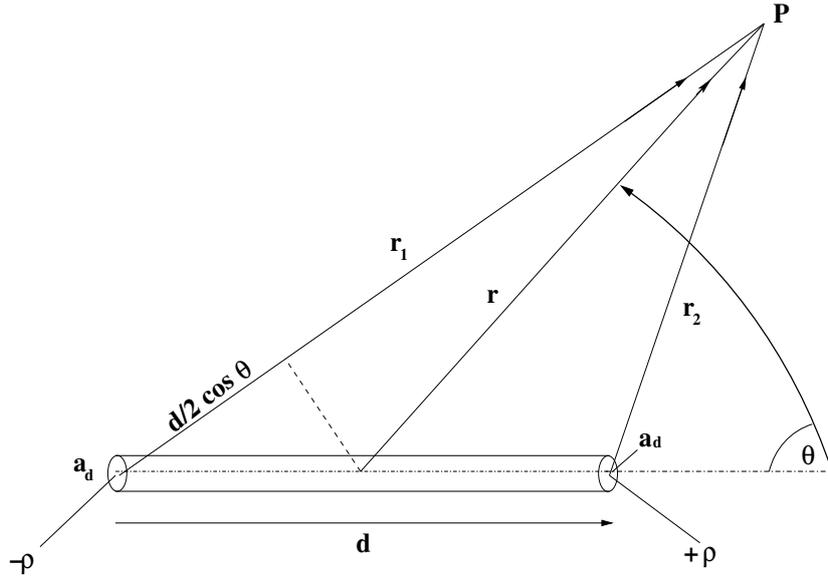


Figura 2.4: Campo magnético em um ponto \mathbf{P} devido a presença de um dipolo magnético (Gontijo, 2013).

Aplicando a lei de Coulomb, o campo magnético no ponto \mathbf{P} próximo a um dipolo é dado por

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\rho_s a_d}{4\pi\mu_0} \left(-\frac{\mathbf{r}_1}{r_1^3} + \frac{\mathbf{r}_2}{r_2^3} \right). \quad (2.49)$$

Analisando a figura (2.4), tem-se que $\mathbf{r}_1 = \mathbf{d}/2 + \mathbf{r}$ e $\mathbf{r}_2 = -\mathbf{d}/2 + \mathbf{r}$. No limite em que $d \ll r$, tem-se uma aproximação para r_1 e r_2 , dada por

$$r_1 \approx r + \frac{d}{2} \cos \theta \quad (2.50)$$

e

$$r_2 \approx r - \frac{d}{2} \cos \theta, \quad (2.51)$$

aplicando o teorema binomial, tem-se que

$$\frac{1}{r_1^3} \approx \frac{1}{r^3} \left(1 - \frac{3d}{2r} \cos \theta \right) \quad (2.52)$$

e

$$\frac{1}{r_2^3} \approx \frac{1}{r^3} \left(1 + \frac{3d}{2r} \cos \theta \right), \quad (2.53)$$

dessa forma, substituindo os resultados (2.52) e (2.53) em (2.49), tem-se

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) \approx \frac{\rho_s a_d d}{4\pi r^3 \mu_0} \left(-\hat{\mathbf{d}} + 3 \cos \theta \hat{\mathbf{r}} \right). \quad (2.54)$$

Note que $\cos \theta = \hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$, $\rho_s = \mu_0 M$ e $V = a_d d$, assim segue-se que

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) \approx \frac{MV}{4\pi r^3} \left(-\hat{\mathbf{d}} + 3(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} \right). \quad (2.55)$$

A equação (2.55) será usada para determinação da energia de interação entre dois dipolos magnéticos. A força magnética por unidade de volume, resultado (2.44), pode ser reescrita utilizando a definição de momento de dipolo magnético, em que $\mathbf{m} = \delta V \mathbf{M} = \delta V M \hat{\mathbf{d}}$.

Portanto, segue-se que

$$\mathbf{f}_m^d = \mu_0 (\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H}. \quad (2.56)$$

Seja a seguinte identidade vetorial:

$$(\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) - \mathbf{H} \cdot \nabla \mathbf{m} - \mathbf{m} \times (\nabla \times \mathbf{H}) - \mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{m}). \quad (2.57)$$

Para \mathbf{m} constante, tem-se que

$$(\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) - \mathbf{m} \times (\nabla \times \mathbf{H}). \quad (2.58)$$

Note que $\nabla \times \mathbf{H} = 0$ no limite magnetostático de Maxwell (Rosensweig, 1985). Assim, a equação (2.56) pode ser escrita como um gradiente de uma energia potencial, dado por

$$\mathbf{f}_m^d = \mu_0 \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}) = -\nabla \Phi_m, \quad (2.59)$$

em que

$$\Phi_m = -\mu_0 (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}). \quad (2.60)$$

Seja \mathbf{H} o campo magnético originado pela presença de um dipolo magnético \mathbf{m}_1 em um outro dipolo \mathbf{m}_2 . Então, aplicando a equação (2.55), tem-se que

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{M_1 V_1}{4\pi r^3} \left[-\hat{\mathbf{d}}_1 + 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} \right]. \quad (2.61)$$

Aplicando a equação (2.61) na equação (2.60), juntamente com a relação $\mathbf{m}_2 = M_2 V_2 = M_2 V_2 \hat{\mathbf{d}}_2$, obtém-se que

$$\Phi_m = -\mu_0 m_2 \hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \frac{m_1}{4\pi r^3} \left[-\hat{\mathbf{d}}_1 + 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} \right], \quad (2.62)$$

dessa forma, a energia de interação entre os dois dipolos, é dada por

$$\Phi_m = \frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^3} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right], \quad (2.63)$$

em que \mathbf{r} é o vetor que sai do dipolo 1 e vai até o 2, e $\hat{\mathbf{d}}_i$ é o vetor unitário na direção do momento de dipolo da partícula i . Aplicando a equação (2.59) e (2.48) combinado com o campo magnético gerado por um dipolo, obtém-se a força e o torque magnético causados por interação dipolar, dado por

$$\mathbf{f}_m^d = \frac{3\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^4} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{d}}_1 (\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) + \hat{\mathbf{d}}_2 (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \right] \quad (2.64)$$

e

$$\mathbf{T}_m^d = -\frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^3} \left[(\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{d}}_2) - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right], \quad (2.65)$$

em que $\mathbf{T}_m^d = -\hat{\mathbf{d}}_1 \times \nabla_{\hat{\mathbf{d}}_1} \Phi$. A força magnética total que atua sobre uma partícula, é a soma da força devido ao campo externo aplicado e a força de interação dipolar, analogamente para o torque magnético total. Para determinar essa força e torque magnético total, considere o seguinte potencial magnético, composto pela soma de um potencial de interação entre momentos de dipolo e um potencial de interação entre um campo externo \mathbf{H} e o momento de dipolo da partícula. Assim, tem-se que

$$\Phi^* = \frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^3} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] - \mu_0 \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{H}. \quad (2.66)$$

A força magnética total sobre a partícula é dada por

$$\mathbf{f}_m = -\nabla \Phi^*, \quad (2.67)$$

portanto, após a determinação dos gradientes com relação a $\hat{\mathbf{r}}$, a expressão final para a força magnética é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_m = \frac{3\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2) \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{d}}_1 (\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) + \hat{\mathbf{d}}_2 (\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \right] \\ + \mu_0 \mathbf{m}_1 \cdot \nabla \mathbf{H}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

O torque magnético total sobre uma partícula magnética é devido à interação dipolar e interação entre o campo externo e o momento de dipolo da partícula, sendo dado por

$$\mathbf{T}_m = -\hat{\mathbf{d}}_1 \times \nabla_{\hat{\mathbf{d}}_1} \Phi^*, \quad (2.69)$$

em que o operador ∇ , neste caso, denota a derivada com relação a direção do vetor orientação $\hat{\mathbf{d}}_1$ do momento de dipolo da partícula 1. Dessa forma, o torque magnético total é dado por

$$\mathbf{T}_m = -\frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r^3} \left[(\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{d}}_2) - 3(\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{r}})(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right] + \mu_0 m_1 H(\hat{\mathbf{d}}_1 \times \hat{\mathbf{h}}), \quad (2.70)$$

em que $\hat{\mathbf{h}}$ é o vetor unitário na direção do campo externo aplicado.

2.8 Dinâmica de Langevin

No método da Dinâmica de Langevin aplicada à simulação microestrutural de colóides magnéticos, as equações do movimento das partículas magnéticas são integradas, e assim, uma evolução temporal da suspensão é realizada. Neste método, um sistema de equações diferenciais estocásticas acopladas para translação e rotação de cada partícula são integradas numericamente. Então, a suspensão, partindo de uma configuração inicial de partículas, evolui dinamicamente no tempo para uma estrutura determinada por meio desta integração numérica. As equações dimensionais, que regem o movimento de cada partícula da suspensão magnética monodispersa desconsiderando as interações hidrodinâmicas, são dadas por

$$m \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = -6\pi\eta a \mathbf{u}_i + \Delta\rho \mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_m^i + \mathbf{f}_r^i + \mathbf{f}_c^i \quad (2.71)$$

$$J \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = -8\pi\eta a^3 \boldsymbol{\omega}_i + 8\pi\eta a^3 \left(\frac{6\mathcal{D}_r}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}_m^i, \quad (2.72)$$

em que m é a massa da partícula, J é o momento de inércia, η é a viscosidade do fluido base em que estão suspensas as partículas, \mathbf{g} é o vetor aceleração da gravidade local e $\Delta\rho = \rho_p - \rho_f$ é a diferença entre a massa específica da partícula e do fluido. A modelagem das interações hidrodinâmicas entre as partículas será objeto de estudo do próximo capítulo. \mathbf{f}_m^i representa a força magnética que age sobre cada partícula devido às interações magnéticas entre os momentos de dipolos das partículas e devido a um campo magnético externo aplicado sobre as mesmas. Essa força de interações magnéticas que atua sobre as partículas em uma suspensão magnética é representada por uma expressão mais geral para um sistema de N

corpos por:

$$\mathbf{f}_m^i = \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] + \mu_0 m_i \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \mathbf{H}, \quad (2.73)$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo, m_i representa o módulo do vetor momento de dipolo da partícula i , $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ representa o vetor unitário na direção da linha de centro que une partículas i e j e \mathbf{H} é o vetor campo magnético externo aplicado à suspensão. O torque magnético definido por \mathbf{T}_m^i que age sobre cada partícula devido as interações entre momentos de dipolos das partículas e um campo externo aplicado, é dado por

$$\mathbf{T}_m^i = - \sum_{i \neq j} \frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{d}}_j) - 3(\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \mu_0 m_i H (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}), \quad (2.74)$$

em que H representa o módulo do campo magnético externo aplicado no local no qual a partícula se encontra e $\hat{\mathbf{h}}$ é o vetor unitário que indica a direção do campo externo. Na equação (2.71), a força \mathbf{f}_r^i representa uma força de repulsão fictícia que age na partícula i próxima do contato com outra partícula ou parede, e \mathbf{f}_c^i representa a força de contato que atua na partícula i devido ao choque com outra partícula. Essas forças são dadas por (Cunha, 1995 e Gontijo, 2013)

$$\mathbf{f}_r^i = \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda (6\pi\eta a) u_i e^{\left(\frac{-\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}}\right)} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (2.75)$$

e

$$\mathbf{f}_c^i = \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} \Upsilon E b^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (2.76)$$

no qual, para equação (2.75) Λ e \mathcal{Y} são constantes de calibração destas forças fictícias, ϵ_{ij} é a distância entre as superfícies das partículas que se aproximam, dada por $\epsilon_{ij} = r_{ij} - 2a$, a é o raio da partícula, r_{ij} é a distância entre os centros das esferas, u_i é a magnitude da velocidade da partícula i e $\hat{\mathbf{e}}_r$ é o vetor unitário que conecta a linha do centro das duas partículas. Na equação (2.76), o parâmetro b é dado por $b = a_i a_j / (a_i + a_j)$, Υ é uma constante de calibração do modelo, E é uma propriedade do material que compõe as esferas, dada por (Gontijo, 2013)

$$\frac{1}{E} = \frac{(1 - \nu_i)}{E_i} + \frac{(1 - \nu_j)}{E_j}, \quad (2.77)$$

em que E_i e E_j representam o módulo de Young, e ν_i e ν_j o módulo de Poisson das esferas i e j respectivamente. A força repulsiva, para uma suspensão monodispersa de esferas, é definida por

$$\mathbf{f}_c^i = \bar{C} E_i a^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (2.78)$$

em que $\bar{C} = \Upsilon/[2^{3/2}(1 - \nu_i)]$.

2.9 Relaxação Magnética

Existem dois mecanismos para a relaxação magnética, dados respectivamente por tempo de relaxação magnética de Néel, τ_N e o tempo de relaxação Browniano, τ_B . No primeiro, o vetor momento de dipolo magnético gira livremente dentro da partícula, sendo definido por

$$\tau_N = \tau_0 \exp\left(\frac{K_s v_p}{k_B T}\right), \quad \tau_N \sim \exp(a^3), \quad (2.79)$$

em que τ_0 é um tempo de relaxação característico cujo o valor típico é da ordem de 10^{-9} s, K_s é a constante de anisotropia da partícula, k_B é a constante de Boltzmann, T denota a temperatura absoluta, a é o raio da partícula e $v_p = (4/3)\pi a^3$ é o volume da partícula magnética.

No segundo mecanismo, esse vetor está preso à partícula, fazendo com que a partícula gire, juntamente com o vetor, sendo definido por

$$\tau_B = \frac{a^2}{\mathcal{D}_t}, \quad \tau_B \sim a^3, \quad (2.80)$$

em que $\mathcal{D}_t = k_B T / 6\pi\eta a$ é o coeficiente de difusão browniano translacional de Stokes-Einstein. Observe que de acordo com a equação (2.79), o tempo de relaxação de Néel possui uma forte dependência com relação ao volume da partícula em comparação com o tempo de relaxação Browniano. Portanto, a partir do diâmetro da partícula se verifica o mecanismo de relaxação magnética dominante. A figura (2.5) apresenta, devido $\tau_B \ll \tau_N$, o momento de dipolo fixo na partícula magnética e a figura (2.6), $\tau_B \gg \tau_N$, dessa forma apresenta o momento de dipolo desacoplado na partícula magnética.

Supondo que as partículas magnéticas sejam suficientemente grandes, para que o tempo de relaxação de Néel seja muito maior que o tempo de relaxamento Browniano, isto é

$\tau_N \gg \tau_B$. Dessa forma, as simulações da dinâmica de fluido magnético foram realizadas para o modelo de "dipolo fixo". Assim, o efeito da rotação do momento da partícula devido aplicação de um campo magnético externo como consequência de uma quantidade finita de anisotropia de partículas é negligenciado neste trabalho.

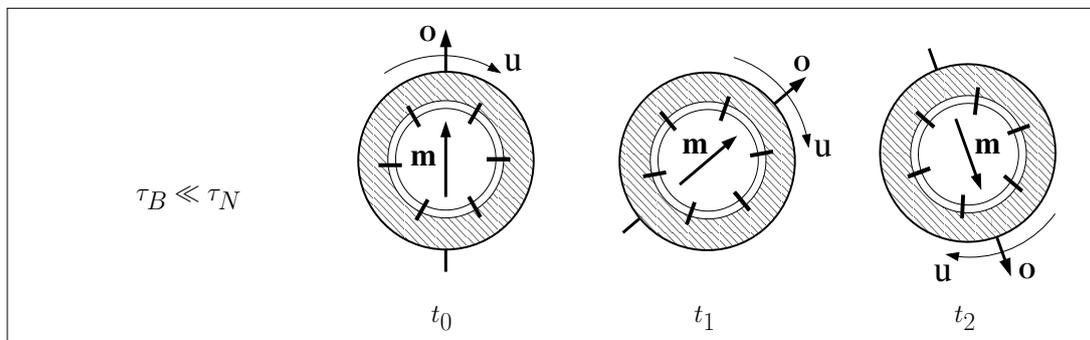


Figura 2.5: Momento de dipolo fixo, característico de partícula com relaxação magnética Browniano (Alegretti, 2017).

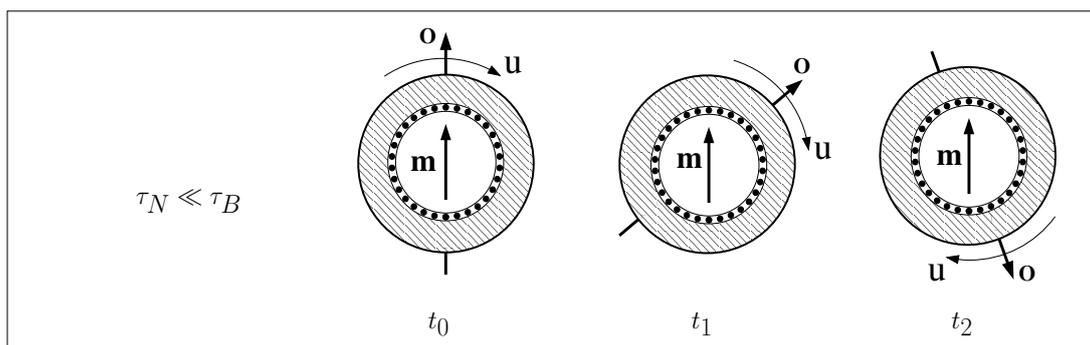


Figura 2.6: Momento de dipolo desacoplado, característico de partícula com relaxação magnética de Néel (Alegretti, 2017).

2.10 Modelos de Magnetização de Equilíbrio

Quando não há campo magnético aplicado, cada partícula do fluido magnético possui um momento de dipolo alinhado a uma direção aleatória, de modo que a média das direções dos momentos de dipolos de todas as partículas com relação a uma direção definida é nula, assim a magnetização de equilíbrio resultante denotada por \mathbf{M}_0 também é nula.

Quando um campo magnético externo é aplicado, a força de interação magnética entre as partículas e o campo tende a orientar os momentos de dipolos na direção deste campo aplicado, à medida em que a força magnética torna-se maior que as forças brownianas, iniciando o processo de magnetização (figura 2.7). A palavra equilíbrio, no termo magnetização de equilíbrio, se refere ao fato do fluido base encontrar-se em repouso.

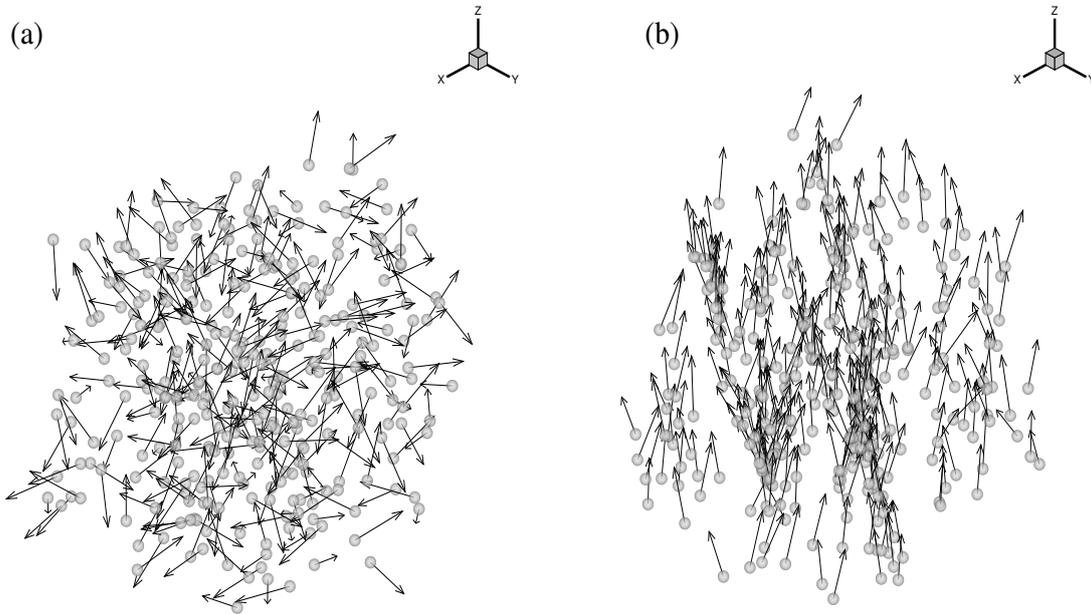


Figura 2.7: Fig. (a), cada partícula na suspensão possui momento de dipolo alinhado em uma direção aleatória, devido a ausência de campo magnético externo. Fig. (b), tem-se o alinhamento parcial de partículas magnéticas suspensas na direção do campo magnético aplicado. Resultados obtidos por meio de simulação computacional de muitos corpos utilizando o código SIMS.

Dizemos que a magnetização de equilíbrio da suspensão atinge seu valor de saturação \mathbf{M}_s , quando todos os momentos de dipolos estão alinhados na direção do campo magnético externo aplicado. Essa condição acontece quando o parâmetro magnético $\alpha = \mu_0 m H / k_B T$, definido como a razão entre forças magnéticas e brownianas, é suficientemente grande, juntamente com o tempo de aplicação do campo magnético externo. Conseqüentemente, a magnetização de equilíbrio é limitada pela magnetização de saturação.

Um modelo de magnetização de equilíbrio de ordem ϕ que despreza interações magnéticas entre partículas, válido para suspensões diluídas, pode ser deduzido a partir da teoria

clássica formulada por Langevin. Assim, dado um campo de magnetização \mathbf{M} e um campo magnético aplicado \mathbf{H} , a intensidade do torque magnético por unidade de volume atuante em \mathbf{M} , possuindo um ângulo θ com relação a direção de \mathbf{H} , é dada por

$$\tau = \mu_0 M H \text{sen}(\theta). \quad (2.81)$$

Se a partícula possui volume v_p , e a intensidade de seu momento magnético é $m = Mv_p$, então a intensidade do torque magnético atuando na partícula é dado por

$$T_m^h = \mu_0 m H \text{sen}(\theta). \quad (2.82)$$

A energia empregada pelo campo \mathbf{H} para alinhar uma única partícula em sua direção, é expressa por

$$W = \int_0^\theta T_m^h d\theta = \mu_0 m H \int_0^\theta \text{sen}(\theta) d\theta = \mu_0 m H [1 - \cos(\theta)]. \quad (2.83)$$

Note que se $\theta = 0$, obtém-se que $W = 0$, e para $\theta = \pi$, a energia gasta será máxima com $W = 2\mu_0 m H$. Considera-se agora a orientação dos dipolos magnéticos, e para isso define-se uma função de distribuição angular para um conjunto de N partículas. Na ausência de um campo magnético aplicado o número de partículas que possui dipolos alinhados entre θ e $\theta + d\theta$ (figura 2.8) é dado por

$$n(\theta)d\theta = N \frac{2\pi \text{sen}(\theta)d\theta}{4\pi(1)^2} = \frac{N}{2} \text{sen}(\theta)d\theta. \quad (2.84)$$

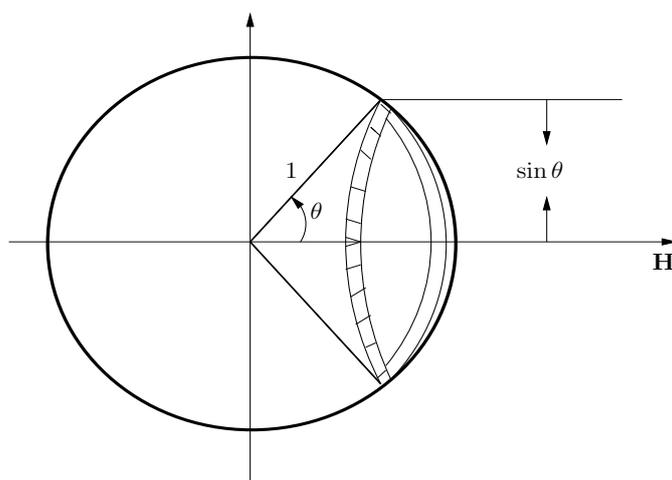


Figura 2.8: Esfera com área da superfície hachurada entre θ e $\theta + d\theta$.

Aplicando a teoria da mecânica estatística, que diz que na presença de um campo magnético, e uma temperatura absoluta T , a probabilidade de se obter dipolos magnéticos em uma orientação fixa é proporcional ao fator de Boltzmann γ , em que

$$\gamma = \exp(-W/k_B T). \quad (2.85)$$

Portanto o número de partícula cujos dipolos estão entre θ e $\theta + d\theta$ é proporcional a

$$n(\theta)d\theta \propto \frac{N}{2} \exp(-W/k_B T) \sin(\theta)d\theta. \quad (2.86)$$

A constante de proporcionalidade pode ser calculada impondo a seguinte condição

$$\int_0^\pi n(\theta)d\theta = N. \quad (2.87)$$

O momento de dipolo efetivo da partícula é a componente ao longo da direção de campo, isto é, $m \cos(\theta)$. Em termos da função de distribuição $n(\theta)$, o valor médio de $m \cos(\theta)$ conforme (2.87), é dado por

$$\bar{m} = \langle m \cos(\theta) \rangle = \frac{\int_0^\pi m \cos(\theta) n(\theta) d(\theta)}{\int_0^\pi n(\theta) d\theta}. \quad (2.88)$$

Substituindo o resultado (2.83) em (2.86) e posteriormente (2.86) em (2.88), tem-se que

$$\bar{m} = \frac{\int_0^\pi m \cos(\theta) e^{\left(\frac{\mu_0 m H \cos(\theta)}{k_B T}\right)} \sin(\theta) d\theta}{\int_0^\pi e^{\left(\frac{\mu_0 m H \cos(\theta)}{k_B T}\right)} \sin(\theta) d\theta}. \quad (2.89)$$

Inserindo o parâmetro α representando a razão entre a energia magnética e energia térmica, chega-se na seguinte expressão para equação (2.89)

$$\bar{m} = \frac{\int_0^\pi m \cos(\theta) e^{\alpha \cos(\theta)} d(\cos(\theta))}{\int_0^\pi e^{\alpha \cos(\theta)} d(\cos(\theta))} = \frac{m \int_{-\alpha}^{\alpha} x e^x dx}{\alpha \int_{-\alpha}^{\alpha} e^x dx}, \quad (2.90)$$

em que foi usado a substituição de variáveis para $x = \alpha \cos(\theta)$. Integrando a equação (2.90), tem-se

$$\frac{\bar{m}}{m} = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha} = \mathcal{L}(\alpha), \quad (2.91)$$

no qual a função $\mathcal{L}(\alpha)$ é chamada de função de Langevin. A magnetização \mathbf{M} do fluido magnético tem a direção do campo aplicado, e sua magnitude é o total dos momentos dipolares das partículas na suspensão na direção do campo aplicado. Segue-se de acordo

com o resultado (2.10), que dado n , o número de densidade das partículas e \bar{m} a magnitude da média dos momentos de dipolos magnéticos na direção do campo aplicado, obtém-se que

$$M = n\bar{m}, \quad (2.92)$$

em que \bar{m} é a componente do momento magnético médio por partículas ao longo da direção do campo. A intensidade da magnetização de saturação M_s do fluido é dada em termos da magnitude do momento magnético médio da partícula quando todas as partículas possuem momento de dipolo alinhado com o campo aplicado, denotado por \bar{m}_s , sendo expressa por

$$M_s = n\bar{m}_s. \quad (2.93)$$

A intensidade da magnetização de saturação M_s do fluido magnético também está relacionada com o produto entre a fração volumétrica ϕ de partículas magnéticas e a magnetização média das partículas sólidas M_d , dada por

$$M_s = \phi M_d, \quad (2.94)$$

combinando as equações (2.92), (2.93) e (2.94), obtém-se

$$\frac{M}{M_s} = \frac{M}{\phi M_d} = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha} = \mathcal{L}(\alpha), \quad (2.95)$$

escrevendo a magnetização de equilíbrio por $M_0 = M$, a equação (2.95) pode ser escrita por

$$M_0 = M_s \mathcal{L}(\alpha). \quad (2.96)$$

Para o limite assintótico em que $\alpha \rightarrow 0$, a expansão de $\mathcal{L}(\alpha)$ em série de Taylor se aproxima de

$$\mathcal{L}(\alpha) \approx \frac{\alpha}{3}. \quad (2.97)$$

Uma forma de expressar o campo de magnetização de equilíbrio é por meio da susceptibilidade χ , sendo expressa por

$$M_0 = \chi H, \quad (2.98)$$

em que a susceptibilidade é função do campo magnético e da temperatura, definida como

$$\chi = \frac{M_0}{H}. \quad (2.99)$$

Um modelo de magnetização de equilíbrio, que leva em consideração as interações dipolares entre trios de partículas, foi proposto por Ivanov e Kuznetsova (2001). O modelo é dado por

$$\begin{aligned} M(H) = & M_L(H) \left[1 + \frac{4\pi}{3} \frac{dM_L(H)}{dH} + \frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^2 M_L(H) \frac{d^2 M_L(H)}{dH^2} \right. \\ & \left. + \frac{(4\pi)^2}{144} \left(\frac{dM_L(H)}{dH} \right)^2 + \dots \right], \end{aligned} \quad (2.100)$$

em que $M_L(H) = \phi M_d \mathcal{L} \left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T} \right)$, $\mathcal{L}(\alpha) = \coth(\alpha) - 1/\alpha$ e $\alpha = \left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T} \right)$.

Desenvolvendo os termos da equação (2.100), tem-se que

$$\frac{d\mathcal{L}(\alpha)}{dH}(\alpha) = -\frac{\mu_0 m}{k_B T} \operatorname{cosech}^2(\alpha) + \left(\frac{1}{\alpha} \right) \frac{1}{H}. \quad (2.101)$$

Aplicando novamente a derivada em (2.101), com relação a H , obtém-se que,

$$\frac{d^2 \mathcal{L}(\alpha)}{dH^2} = 2 \left(\frac{\mu_0 m}{k_B T} \right)^2 \operatorname{cosech}^2(\alpha) \coth(\alpha) - \frac{2}{\alpha H^2}. \quad (2.102)$$

Então substituindo (2.101) e (2.102) em (2.100), obtém-se que

$$\begin{aligned} M_0 = & M_d \mathcal{L}(\alpha) \phi + \frac{4\pi}{3} M_d \left(\frac{M_d}{H} \right) \mathcal{L}(\alpha) \left[-\alpha \operatorname{cosech}^2(\alpha) + \frac{1}{\alpha} \right] \phi^2 + \\ & + \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^2 \left(\frac{M_d}{H} \right)^2 \mathcal{L}(\alpha)^2 \left[2\alpha^2 \operatorname{cosech}^2(\alpha) \coth(\alpha) - \frac{2}{\alpha} \right] \right\} M_d \phi^3 + \\ & + \left\{ \frac{(4\pi)^2}{144} \left(\frac{M_d}{H} \right)^2 \mathcal{L}(\alpha) \left[-\alpha \operatorname{cosech}^2(\alpha) + \frac{1}{\alpha} \right]^2 \right\} M_d \phi^3. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Considere agora o seguinte parâmetro adimensional de interação dipolar, definido por $\lambda = \mu_0 m^2 / \pi k_B T d^3$ em que $m = M_d \pi d^3 / 6$. Assim podemos escrever λ , como

$$\lambda = \frac{\mu_0 M_d^2 \pi d^3}{36 \kappa T}, \quad (2.104)$$

utilizando (2.104), na relação M_d/H , obtém-se que

$$\frac{M_d}{H} = \lambda \left(\frac{6}{\alpha} \right), \quad (2.105)$$

substituindo o termo (2.105) em (2.103), e posteriormente dividindo toda a equação resultante por M_d , tem-se que

$$\frac{M_0}{M_d} = \mathcal{L}(\alpha)\phi + E(\alpha)\lambda\phi^2 + [F(\alpha) + G(\alpha)]\lambda^2\phi^3, \quad (2.106)$$

em que as funções $E(\alpha)$, $F(\alpha)$ e $G(\alpha)$ são dadas por:

$$E(\alpha) = \frac{\pi}{3} \left(\frac{24}{\alpha} \right) \mathcal{L}(\alpha) \left[-\alpha \operatorname{cossech}^2(\alpha) + \frac{1}{\alpha} \right], \quad (2.107)$$

$$F(\alpha) = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{3} \right)^2 \left(\frac{24}{\alpha} \right)^2 \mathcal{L}(\alpha)^2 \left[2\alpha^2 \operatorname{cossech}^2(\alpha) \coth(\alpha) - \frac{2}{\alpha} \right], \quad (2.108)$$

$$G(\alpha) = \frac{(\pi)^2}{144} \left(\frac{24}{\alpha} \right)^2 \mathcal{L}(\alpha) \left[-\alpha \operatorname{cossech}^2(\alpha) + \frac{1}{\alpha} \right]^2. \quad (2.109)$$

2.11 Adimensionalização e Identificação dos Parâmetros Físicos do Problema

Foram utilizadas as seguintes escalas características, para a adimensionalização das equações governantes (2.71) e (2.72).

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_s}, \quad \tilde{t} = \frac{tU_s}{a}, \quad \tilde{\boldsymbol{\omega}} = \frac{\boldsymbol{\omega}a}{U_s}, \quad (2.110)$$

em que $U_s = (2/9\eta)\Delta\rho ga^2$ é a velocidade de Stokes da partícula. Assim, substituindo (2.110), obtém-se as seguintes equações governantes adimensionais que regem o movimento translacional e rotacional de cada partícula da suspensão magnética sem interações hidrodinâmicas, dadas por (Gontijo e Cunha, 2015 e 2017)

$$St \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_i}{dt} = \tilde{\mathbf{u}}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \tilde{\mathbf{f}}_m^i + \tilde{\mathbf{f}}_r^i + \tilde{\mathbf{f}}_c^i \quad (2.111)$$

e

$$St_r \frac{d\tilde{\boldsymbol{\omega}}}{dt} = -\tilde{\boldsymbol{\omega}} + \left(\frac{6}{Pe_r\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \tilde{\mathbf{T}}_m^i, \quad (2.112)$$

em que

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_m^i &= \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe} \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}}, \end{aligned} \quad (2.113)$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_r^i = \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda |\tilde{\mathbf{u}}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathfrak{V}})} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (2.114)$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_c^i = \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} P_c(\epsilon_{ij})^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r \quad (2.115)$$

e

$$\tilde{\mathbf{T}}_m^i = \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe_r} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\frac{1}{3} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{d}}_j) - (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \frac{\alpha}{Pe_r} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}). \quad (2.116)$$

Segue-se também que Pe , é o número de Péclet, definido como a razão entre o tempo característico de difusão browniana $\tau_B = a^2/\mathcal{D}_t$ e o tempo característico de sedimentação $\tau_s = a/U_s$, expresso por

$$Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}_t}, \quad (2.117)$$

e St é o número de Stokes, definido como a razão entre o tempo de relaxação inercial ou de resposta da partícula $\tau_r = m/6\pi\eta a^2$ e o tempo característico de sedimentação τ_s , dado por

$$St = \left(\frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \right), \quad (2.118)$$

St_r , Pe_r , representam o número de Stokes e número de Péclet rotacionais, definidos por

$$St_r = \frac{JU_s}{8\pi\eta a^4}, \quad Pe_r = \frac{U_s}{\mathcal{D}_r a}, \quad (2.119)$$

$\lambda = \mu_0 m_d^2 / 4\pi k_B T d^3$ é a razão entre a força de interação partícula-partícula e força browniana, o parâmetro $\alpha = \mu_0 m_d H_0 / k_B T$ é definido como a razão entre a força de interação partícula-campo e força browniana, e

$$\hat{g} = \frac{\Delta\rho g(4/3)\pi a^3}{6\pi\eta a U_s}, \quad P_c = \frac{\overline{C} E_i a^{1/2}}{6\pi\eta a U_s}. \quad (2.120)$$

Para maiores detalhes do desenvolvimento da adimensionalização das equações governantes (2.71) e (2.72), veja Apêndice I.

2.12 Interações Magnéticas Periódicas

As somas de Ewald, é um método eficaz para computar interações de longo alcance em sistemas periódicos. Esse método foi desenvolvido inicialmente para calcular energias eletrostáticas de cristais iônicos. Para acelerar a convergência das somas das interações de partículas, as interações de longo alcance são divididas em duas partes: uma contribuição de curto alcance calculada no espaço real e uma contribuição de longo alcance calculada no espaço de Fourier, também chamado espaço recíproco ou número de onda. A vantagem deste método é a rápida convergência em comparação com a soma direta. Isso significa que o método tem alta precisão e velocidade razoável ao computar interações de longo alcance, portanto, é o método padrão de fato para calcular interações de longo alcance em sistemas periódicos.

Na técnica de soma de Ewald, considera-se uma suspensão com condições de contorno periódicas, como mostrado na figura (2.9), bidimensional para uma melhor visualização. A célula central de partículas definida por $\Omega = [0, l_1) \times [0, l_2) \times [0, l_3)$, é replicada periodicamente em todas as direções, e suas réplicas são chamadas de células imagem, contendo também N partículas. A configuração instantânea da suspensão em cada célula imagem é idêntica à configuração da célula central, em cada instante de tempo. As condições de contorno das partículas na célula central são periódicas, assim, se uma partícula atravessa a parte inferior da célula, ela reaparece na parte superior por meio da condição de periodicidade, expressa matematicamente por (Abade, 2005)

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} + \varphi_1 \hat{\mathbf{e}}_1 \hat{\mathbf{e}}_1 + \varphi_2 \hat{\mathbf{e}}_2 \hat{\mathbf{e}}_2 + \varphi_3 \hat{\mathbf{e}}_3 \hat{\mathbf{e}}_3, \quad (2.121)$$

em que $\mathbf{P}(l_1, l_2, l_3)$ é um operador periodicidade aplicado a cada vetor posição \mathbf{x}_α , com $\alpha = 1, \dots, N$ e φ_i para $i = 1, 2, 3$ é dada por

$$\varphi_i = \begin{cases} -l_i, & \text{se } x_i > l_i \\ 0, & \text{se } 0 \leq x_i \leq l_i \\ l_i, & \text{se } x_i < 0 \end{cases} \quad (2.122)$$

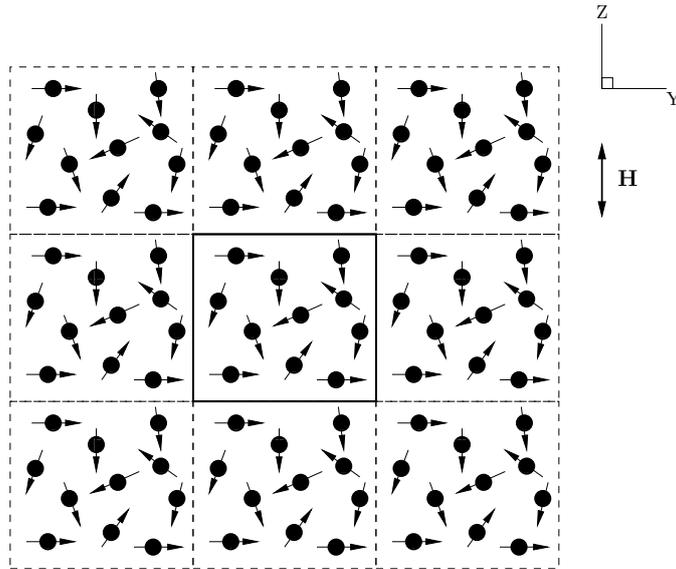


Figura 2.9: Geometria típica de uma suspensão com condições de contorno periódicas, mostrada em uma perspectiva bidimensional.

Para o cálculo das interações entre partículas dentro de uma célula de referência, é necessário o cálculo não apenas das interações devidas a outras partículas dentro da célula de referência, mas também, das interações com todas as imagens de partículas através de uma estrutura (*lattice*) espacialmente periódica. Uma característica interessante desta técnica é que não é necessário calcular as interações entre as imagens.

No exemplo , apresentado na figura (2.10), no qual se destaca a interação dipolar de uma partícula teste da célula central com todas as outras partículas, cada partícula da célula central realiza interações dipolares com as $N - 1$ partículas na mesma célula e com as $N \times (N_c - 1)$ partículas imagens, que se encontram nas outras células. Deste modo, cada partícula da célula central realizará um total de interações dipolares, dadas por

$$N_{iter} = N \times (N_c - 1) + (N - 1), \quad (2.123)$$

em que N_{iter} é o número de interações dipolares realizada por uma partícula da célula central, N_c é o número total de células. Assim, por exemplo, para a derterminação do número de interações dipolares de cada partícula em uma simulação contendo 300 partículas na célula central, e um total de $N_c = 125$, obtém-se que, $N_{iter} = (300 \times 124 + 299) = 37.499$ interações dipolares. Esse valor se refere apenas ao número de interações de uma única partícula na célula central. Para computar as interações dipolares de todas as partículas para um único instante de tempo, tem-se um total de $37.499 \times 300 = 11.249.700$ interações dipolares.

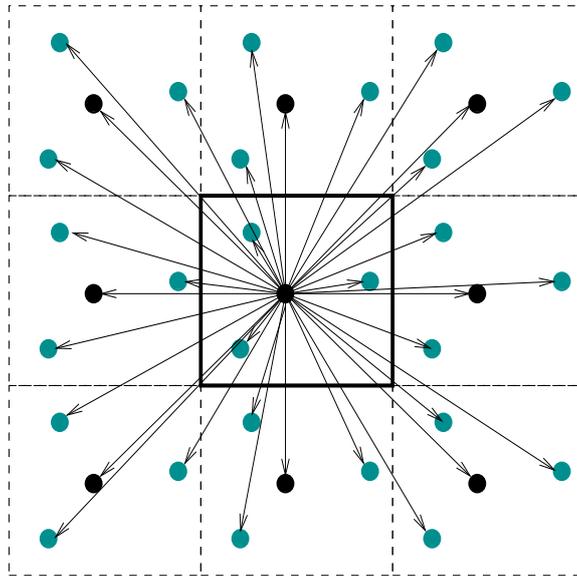


Figura 2.10: Esquemática de uma estrutura periódica contendo 9 células e 4 partículas na célula central, destacando-se as interações dipolares de uma partícula de referência em preto, com todas as outras partículas.

Na estrutura periódica ou *lattice* periódica, o conjunto de vetores $C_N = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$, representa a posição de N partículas esféricas dentro de uma célula unitária central ou de referência. O conjunto C_N pode ser expresso por uma *lattice* \mathcal{L} , como (Gontijo e Cunha, 2017)

$$\mathcal{L} = (\mathbf{x}_{\gamma_1}, \dots, \mathbf{x}_{\gamma_N}) = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_{\gamma_1}, \dots, \mathbf{x}_N + \mathbf{x}_{\gamma_N}) \quad (2.124)$$

em que $\mathbf{x}_{\gamma} = (\gamma_1 l_1, \gamma_2 l_2, \gamma_3 l_3)$, $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ denota os pontos da *lattices*, obtidos por meios de uma combinação linear de vetores ortogonais básicos $l_1 \hat{\mathbf{e}}_1, l_2 \hat{\mathbf{e}}_2, l_3 \hat{\mathbf{e}}_3$,

em que l_1, l_2 e l_3 são os comprimentos das arestas da célula central, os elementos do conjunto $\gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3\}$ são chamados índices das células, no caso em que $\gamma = \{0, 0, 0\}$ a célula em questão é a célula central, e o conjunto de vetores $\{\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3\}$ denota a base canônica. No espaço recíproco o conjunto de vetores $\hat{\mathcal{L}}$ é dado por

$$\hat{\mathcal{L}} = (\mathbf{k}_{\zeta_1}, \dots, \mathbf{k}_{\zeta_N}) = (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_{\zeta}, \dots, \mathbf{k}_N + \mathbf{k}_{\zeta}) \quad (2.125)$$

em que os vetores \mathbf{k}_{ζ} do *lattice* recíproco (ou número de onda) $\hat{\mathcal{L}}$, são definidos como $\mathbf{k}_{\zeta} = 2\pi(\zeta_1/l_1, \zeta_2/l_2, \zeta_3/l_3)$, sendo $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$, em que $\zeta = \{\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3\}$ é o índice da célula do *lattice* recíproco.

Um outro método numérico aplicado neste trabalho, para o cômputo de interações magnéticas relacionadas com as forças magnéticas, com decaimento da ordem de $1/r^4$, é chamado método da Mínima Imagem. Assim, novamente a célula central de partículas é replicada em todas as direções, como mostrado na figura (2.11). Neste método numérico, é criada uma célula com as mesmas dimensões da célula central, em torno da partícula. Dessa forma, a partícula interage somente com as partículas ou imagens de partículas que estão no interior deste domínio físico. Assim cada partícula interage com as $N - 1$ partículas ou suas imagens mais próximas (Rosa, 2014). De acordo com a figura (2.11), a partícula 1 interage com todas as partículas dentro da célula em torno da mesma. Assim, a partícula 1 por exemplo, interage com a imagem da partícula 2 e não com a partícula 2, que está na célula central, mas fora da célula em torno da partícula 1.

Aplicando a técnica de soma de Ewald (Ewald, 1921), para consideração de interações magnéticas periódicas em uma suspensão magnética, obtemos uma nova expressão para a força e torque magnéticos periódicos em uma partícula i . Portanto, a força magnética periódica é dada por (Gontijo e Cunha, 2017)

$$\mathbf{f}_m^i = \mu_0 m_i m_j \left\{ \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} [\mathcal{J}_1(r) + \mathcal{J}_2(r)] + \frac{2\pi}{L^4} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathcal{J}_3(k) \right\}, \quad (2.126)$$

em que \mathcal{L} são as *lattices* no espaço físico e $\hat{\mathcal{L}}$ são as *lattices* no espaço recíproco (ou número de onda), r denota a distância entre o centro de duas partículas que interagem, k denota a intensidade do vetor do espaço recíproco e $L = V^{1/3}$ no qual V é o volume da célula central. Os termos $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$ e \mathcal{J}_3 , são dados por

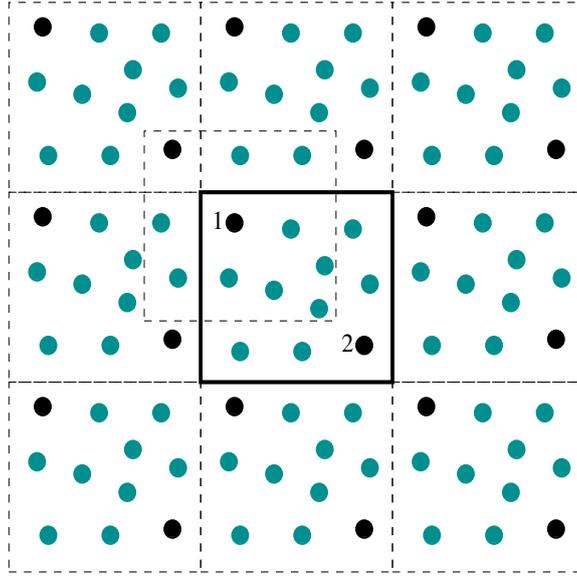


Figura 2.11: Esquemática de uma estrutura periódica contendo 9 células e 11 partículas na célula central, destacando-se o método da Mínima Imagem.

$$\mathcal{J}_1(r) = [(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j)\hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{d}}_j + (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{d}}_i]\mathcal{C}(r), \quad (2.127)$$

$$\mathcal{J}_2(r) = -[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij}]\mathcal{D}(r), \quad (2.128)$$

$$\mathcal{J}_3(k) = 4\pi\hat{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{k}})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{k}}) \exp\left[-\left(\frac{\pi k}{\xi}\right)^2\right] \text{sen}(2\pi\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}), \quad (2.129)$$

em que $\xi = \pi^{1/2}V^{-1/3}$ denota o parâmetro ótimo de controle para convergência das somas de *lattices* (Beenakker, 1986) e $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. As funções escalares $\mathcal{C}(r)$ e $\mathcal{D}(r)$ são dadas por

$$\mathcal{C}(r) = [3 \text{erfc}(\xi r) + \left(\frac{2\xi r}{\sqrt{\pi}}\right) (3 + 2\xi^2 r^2) \exp(-\xi^2 r^2)]r^{-4}, \quad (2.130)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(r) &= [15 \text{erfc}(\xi r) + \left(\frac{2\xi r}{\sqrt{\pi}}\right) (15 + 10\xi^2 r^2 + 4\xi^4 r^4) \\ &\times \exp(-\xi^2 r^2)]r^{-4} \end{aligned} \quad (2.131)$$

O torque magnético periódico em uma partícula i devido as interações magnéticas é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_m^i &= \mu_0 m_i m_j \left[-\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathcal{T}_1(r) + \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathcal{T}_2(k) \right] \\ &+ \mu_0 m_i H(\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}), \end{aligned} \quad (2.132)$$

com

$$\mathcal{T}_1(r) = (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{d}}_j) \mathcal{B}(r) - (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathcal{C}(r), \quad (2.133)$$

$$\mathcal{T}_2(k) = 4\pi(\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{k}})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{k}}) e^{[-(\frac{\pi k}{L\xi})^2]} \cos(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \quad (2.134)$$

em que

$$\mathcal{B}(r) = \left[\operatorname{erfc}(\xi r) + \left(\frac{2\xi r}{\sqrt{\pi}} \right) \exp(-\xi^2 r^2) \right] r^{-3}, \quad (2.135)$$

e L denota o comprimento da célula.

Para adimensionalização das forças e torques periódicos, foram utilizados as grandezas adimensionais referente o resultado (2.110). Dessa forma, tem-se que a forças e torques periódicos adimensionais são dados por

$$\tilde{\mathbf{F}}_m^i = \frac{24\pi\lambda}{Pe} \left\{ \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} [\mathcal{J}_1(r) + \mathcal{J}_2(r)] + \frac{2\pi}{\tilde{L}^4} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathcal{J}_3(k) \right\} \quad (2.136)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_m^i &= \frac{24\pi\lambda}{Pe_r} \left[- \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathcal{T}_1(r) + \frac{1}{\tilde{L}^3} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathcal{T}_2(k) \right] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe_r} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}), \end{aligned} \quad (2.137)$$

em que $\tilde{L} = L/a$.

CAPÍTULO 3

INTERAÇÕES HIDRODINÂMICAS

Neste capítulo são apresentados fundamentos da Microhidrodinâmica utilizados na modelagem do movimento de partículas sujeitas às interações hidrodinâmicas. Foram abordadas as equações governantes do escoamento de fluido newtoniano incompressível para baixos números de Reynolds ($Re \ll 1$), conhecidas por equações de Stokes. A solução fundamental das equações de Stokes foi obtida por meio de uma metodologia comumente empregada na solução de equações diferenciais parciais lineares que governam sistemas físicos modelados, conforme a teoria do potencial hidrodinâmico. As interações hidrodinâmicas, nas quais possuem decaimento lento ($1/r$), foram implementadas através de simulações em sistemas de contornos periódicos (método das somas de Ewald).

3.1 Linearidade das Equações de Stokes

No limite assintótico, em que o número de Reynolds da partícula, $Re = \rho_s a U_s / \eta \ll 1$, as equações governantes do escoamento de fluido newtoniano incompressível são as equações de Stokes, determinadas respectivamente por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{3.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} = 0, \quad (3.2)$$

em que ∇ é o operador do vetor gradiente, \mathbf{u} denota o campo de velocidade euleriano de fluxo. A equação constitutiva para o tensor de tensões é definida por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}, \quad (3.3)$$

em que p é a pressão mecânica no fluido, η viscosidade dinâmica e \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação, definido como sendo a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade dado por

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]. \quad (3.4)$$

Considerando o caso em que \mathbf{g} é um campo conservativo tem-se a seguinte expressão para a pressão modificada, dada por $p = p^* - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ em que $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$ é a magnitude da aceleração da gravidade e p^* é a pressão hidrodinâmica ou pressão mecânica em um ponto qualquer do espaço. Dessa forma, a equação do movimento do fluido é dada por

$$-\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} = 0. \quad (3.5)$$

Uma consequência importante da linearidade das equações de Stokes, resulta do fato que as forças hidrodinâmicas induzidas no fluido pelo movimento das partículas são diretamente proporcionais às velocidades induzidas pelas partículas. Dessa relação linear, surgem as chamadas formulações de mobilidade e resistência, usadas respectivamente para calcular as velocidades ou forças induzidas por interações hidrodinâmicas entre partículas. No presente trabalho consideraremos que as partículas estão livres de inércia para que uma formulação de mobilidade possa ser usada.

Nota-se que mesmo que a configuração geométrica dos contornos sólidos de uma partícula imersa em um fluido esteja em constante mudança, assume-se aqui a hipótese de escoamento quase-estacionário, em consequência de $Re \ll 1$, visto que, o tempo requerido para a evolução do campo de velocidade de um estado permanente para outro é muito menor do que o tempo típico de uma mudança perceptível na configuração do contorno. Fisicamente, a aproximação quase-estacionária significa que o fluido se ajusta instantaneamente à mudança da distribuição das partículas devido à rápida difusão da vorticidade

por ação da viscosidade do fluido. Neste caso, os campos de pressão e velocidade se ajustam em intervalos muito menores em relação a taxa, na qual, a configuração do contorno muda, conseqüentemente, do ponto de vista de uma partícula material, o escoamento aparece como sendo sempre permanente com respeito a configuração presente (Cunha, 2016). É importante falar que a inexistência da derivada temporal espacial na equação de Stokes não implica, necessariamente, que o escoamento é permanente, mas reflete o fato de que as forças hidrodinâmicas encontram-se em estado de equilíbrio dinâmico. Dessa forma, o tempo no escoamento de Stokes aparece apenas porque o campo de velocidade em qualquer instante depende da geometria do contorno e esta pode depender do tempo.

Uma grande diferença das equações de Stokes, em comparação com as equações de Navier-Stokes, é sua propriedade de linearidade, podendo ser resolvidas por métodos analíticos convencionais de solução para este tipo de problema. Uma segunda consequência importante desta linearidade, é o fato do arrasto ou magnitude da força hidrodinâmica sobre uma partícula movendo-se com velocidade uniforme ser diretamente proporcional a velocidade da partícula. Essa propriedade pode ser constatada através de uma análise de escala da equação (3.5), uma vez que $|\eta\nabla^2\mathbf{u}| \sim \eta\mathbf{U}/l^2$ é uma escala de tensões viscosas e $|\nabla p| \sim \mathbf{F}/l^3$ é uma escala de pressão em que l é uma escala de comprimento característico da partícula e \mathbf{U} é uma escala de velocidade do movimento, assim tem-se que $\mathbf{F}/l^3 \sim \eta\mathbf{U}/l^2$, e portanto segue-se que

$$\mathbf{F} \sim \eta l \mathbf{U}. \quad (3.6)$$

Conforme a propriedade de linearidade das equações de Stokes, destaca-se também a aplicação do princípio da superposição para resolução de problemas de movimento de vários corpos em regime de baixo número de Reynolds, desse modo a soma de diferentes soluções das equações de Stokes é também uma solução destas equações. Em vista disso, surgem conceitos de mobilidade e resistência, de modo que, para o problema de mobilidade as velocidades de n partículas que interagem hidrodinamicamente podem ser calculadas por meio das forças que agem sobre as partículas, dada por

$$\mathbf{u}^i = \mathbf{u}_0^i + \sum_{i \neq j} \mathbf{M}_{ij} \cdot \mathbf{F}^j(\mathbf{x}_j), \quad (3.7)$$

em que \mathbf{M}_{ij} é chamada de matriz mobilidade, ao passo que para um problema de resistência, as forças hidrodinâmicas sobre as partículas podem ser determinadas em função de suas

velocidades, expressa por

$$\mathbf{F}_0^i = \mathbf{F}^i + \sum_{i \neq j} \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{u}^j(\mathbf{x}_j), \quad (3.8)$$

em que \mathbf{R}_{ij} é a matriz resistência.

Outra propriedade importante do escoamento de Stokes, é sua reversibilidade, assim como o movimento $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ é uma função linear da força hidrodinâmica aplicada, então se o sentido da força é revertido, reverte-se também o movimento.

3.2 A Solução Fundamental

Para obtenção da solução fundamental das equações de Stokes, é utilizado um procedimento de acordo com os fundamentos para solução de equações diferenciais parciais lineares que governam sistemas físicos modelados, conforme a teoria do potencial hidrodinâmico. Esta solução fundamental (Ladyzhenskaya, 1969), corresponde ao escoamento gerado pela presença de um ponto de força ou singularidade em um domínio tridimensional infinito de fluido e fornece o campo de pressão, velocidade e tensão deste escoamento. Dessa forma, buscamos a solução para o seguinte sistema de equações

$$-\eta \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{F} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.10)$$

em que \mathbf{F} é uma força concentrada ou monopolo, que um ponto de singularidade realiza sobre o fluido ao se transladar, localizado em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ e $\delta(\mathbf{x})$ é a distribuição de delta de Dirac tridimensional, satisfazendo as seguintes propriedades

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dV = 1 \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) f(\mathbf{x}) dV = f(\mathbf{x}_0), \quad (3.11)$$

em que o símbolo de integral simples é utilizado para representar uma soma sobre todo o espaço tridimensional, físico ou recíproco e $f(\mathbf{x}_0)$ é uma função regular qualquer. Pela definição do operador delta, a força \mathbf{F} possui somente um valor diferente de zero quando $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, significando que toda força que uma partícula realiza no fluido se concentra em um ponto de singularidade. A solução fundamental das equações de Stokes permanentes para

o espaço livre, pode ser determinada por meio do seguinte par de transformadas de Fourier tridimensionais, dadas por

$$\mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\} = \hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (3.12)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{\hat{f}(\mathbf{k})\} = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \hat{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}. \quad (3.13)$$

A equação (3.12) pode ser interpretada como a projeção da função $f(\mathbf{x})$ em um espaço de ondas planas com $f(\mathbf{k})$ a amplitude de cada onda $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. O operador ∇ do espaço físico assume a forma simples $-i\mathbf{k}$ no espaço de Fourier e o laplaciano ∇^2 no espaço recíproco de Fourier é dado por $-k^2$. Dessa forma, tem-se os seguintes resultados decorrentes das propriedades da transformada de Fourier

$$\mathcal{F}\{\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x})\} = i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}), \quad (3.14)$$

$$\mathcal{F}\{\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x})\} = -k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}), \quad (3.15)$$

$$\nabla \mathcal{F}^{-1}\{\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})\} = \mathcal{F}\{i\mathbf{k} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})\}, \quad (3.16)$$

em que $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})$ representa o vetor campo de velocidades do escoamentos no espaço de número de onda e $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ representa o campo vetorial de velocidades no espaço físico tridimensional. Aplicando a transformada de Fourier na equação da continuidade, tem-se

$$\mathcal{F}\{\nabla \cdot \mathbf{u}\} = 0, \quad \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = 0. \quad (3.17)$$

Agora aplicando novamente a transformada de Fourier à equação da quantidade de movimento e considerando, sem perda de generalidade, que $\mathbf{x}_0 = 0$, isto é, a singularidade esteja na origem, segue-se que

$$\eta k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) - i\mathbf{k} \hat{p}(\mathbf{k}) = \mathbf{F} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (3.18)$$

usando a equação (3.11), tem-se

$$\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{0}} = 1, \quad (3.19)$$

substituindo a equação (3.19) em (3.18), obtém-se a seguinte expressão para a equação da quantidade de movimento do espaço recíproco

$$\eta k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) - i\mathbf{k}\hat{p}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathbf{F}, \quad (3.20)$$

fazendo o produto escalar de \mathbf{k} na equação (3.20), usando a equação (3.17) e finalmente isolando a pressão no espaço recíproco, obtém-se

$$\hat{p}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)} \frac{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{F})}{k^2}. \quad (3.21)$$

Aplicando a transformada de Fourier inversa na equação (3.21) para determinar a pressão $p(\mathbf{x})$ e observando que $\nabla = -i\mathbf{k}$, tem-se que

$$p(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \frac{1}{(2\pi)} \frac{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{F})}{k^2} \right\} = \frac{1}{8\pi^3} \mathbf{F} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} \frac{i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} = \frac{-\mathbf{F}}{8\pi^3} \cdot \nabla \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k}. \quad (3.22)$$

A integral da equação (3.22) é determinada utilizando-se coordenadas esféricas no espaço recíproco, sendo assim segue-se que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} = 2\pi \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{e^{ikr \cos \theta}}{k^2} \sin \theta d\theta k^2 dk = \frac{2\pi^2}{r}, \quad (3.23)$$

em que $r = |\mathbf{x}|$. Desta forma, substituindo a equação (3.23) em (3.22), temos que o campo de pressão do escoamento no espaço físico é dado por

$$p(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{F}}{8\pi} \cdot \frac{2\mathbf{x}}{r^3}. \quad (3.24)$$

Para um ponto de força localizado em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ genérico do fluido, o campo de pressão fica modificado apenas por uma translação, assim temos que o campo de pressão pode ser representado de forma mais geral por

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = -\mathbf{F} \cdot \mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (3.25)$$

em que

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{1}{8\pi} \cdot \frac{2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^3}, \quad (3.26)$$

é a função de Green associada ao campo de distúrbio de pressão, definido como vetor propagador dos distúrbios de pressão. O campo de velocidade no espaço recíproco de Fourier (ou espaço de número de onda) pode ser obtido substituindo a equação (3.21) em (3.20) e após algumas manipulações algébricas, obtém-se

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^{3/2}\eta k^2} \mathbf{F} \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right). \quad (3.27)$$

Aplicando a transformada de Fourier inversa na equação (3.27), segue-se que

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\{\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})\} = -\frac{1}{8\pi^3\eta}\mathbf{F} \cdot \left[\mathbf{I} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^2} d\mathbf{k} - \nabla\nabla \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^4} d\mathbf{k} \right]. \quad (3.28)$$

Novamente utilizando coordenadas esféricas, tem-se que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{k^4} d\mathbf{k} = -\pi^2|\mathbf{x}|, \quad (3.29)$$

substituindo as equações (3.29) e (3.23) em (3.28), obtém-se o seguinte campo de velocidade no espaço físico tridimensional, dado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{F}}{8\pi\eta} \cdot \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{x}\mathbf{x}}{r^3} \right). \quad (3.30)$$

Considerando o caso mais geral em que $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ genérico, o campo de velocidade no espaço físico fica modificado por apenas uma translação, assumindo a seguinte forma

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = -\frac{\mathbf{F}}{8\pi\eta} \cdot \left[\frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^3} \right]. \quad (3.31)$$

O campo de velocidade \mathbf{u} pode ser expresso da seguinte maneira

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{-\mathbf{F}}{8\pi\eta} \cdot \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (3.32)$$

em que

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \left[\frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^3} \right], \quad (3.33)$$

é um tensor de segunda ordem simétrico e positivo definido, chamado de função de Green para o campo de velocidades ou propagador do distúrbio hidrodinâmico, ou ainda, tensor de Oseen-Burgers, de natureza puramente geométrica e portanto independente das propriedades do fluido. Além disso, os distúrbio se propagam com decaimento lento da ordem de $\mathcal{O}(1/r)$, sendo que r é a distância com relação ao pólo \mathbf{x}_0 . Dessa forma, este lento decaimento caracteriza o longo alcance das interações hidrodinâmicas e mesmo partículas relativamente afastadas umas das outras interagem de forma significativa levando a problemas de divergência das somas ou superposição de campos de distúrbio induzidos por um grande número de singularidades.

O tensor de tensões associado a uma função de Green, pode ser obtido a partir da equação constitutiva para o tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ de um fluido Newtoniano incompressível. Para isso basta aplicar as equações (3.25) e (3.32) no tensor de taxa de deformação $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \eta[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T]$. Após alguns cálculos, segue-se que

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{\mathbf{F}}{8\pi} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (3.34)$$

em que o tensor de terceira ordem, dado por

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{6(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^5}, \quad (3.35)$$

é uma função de Green tensorial associada à propagação do distúrbio de tensão gerado por um dipolo hidrodinâmico em um escoamento de Stokes.

3.3 Teorema Recíproco de Lorentz

O teorema Recíproco de Lorentz estabelece uma relação entre dois escoamentos de Stokes na mesma região, de forma que através da obtenção da solução dos campos $(\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}')$ de um escoamento conhecido é possível obter informação sobre um outro escoamento sem a necessidade de se resolver as equações do movimento explicitamente. Dessa forma, considere $(\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}')$ e $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ dois campos de escoamentos diferentes que satisfazem as equações de Stokes em uma região V , delimitada pela superfície S . Então, o teorema recíproco afirma que (Kim e Karrila, 1991)

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{u}' \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}') - \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}'). \quad (3.36)$$

Para a demonstração do teorema, considere um fluido Newtoniano incompressível de viscosidade η , dessa forma os tensores de tensão $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{\sigma}'$ são expressos em notação indicial, respectivamente por

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta D_{ij}, \quad (3.37)$$

$$\sigma'_{ij} = -p'\delta_{ij} + 2\eta D'_{ij}, \quad (3.38)$$

multiplicando a equação (3.38), pela componente D_{ij} do tensor taxa de deformação do escoamento $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ e utilizando a equação da continuidade para um escoamento incompressível, obtém-se que

$$\sigma'_{ij}D_{ij} = -p\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + 2\eta D'_{ij}D_{ij} = 2\eta D'_{ij}D_{ij}, \quad (3.39)$$

analogamente, tem-se que

$$\sigma_{ij}D'_{ij} = 2\eta D_{ij}D'_{ij}, \quad (3.40)$$

da simetria do tensor \mathbf{D} e das equações (3.39) e (3.40), segue-se em notação de Gibbs que

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}' = \boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{D}, \quad (3.41)$$

outro resultado importante da simetria do tensor taxa de deformação, é que

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}' = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}' \quad e \quad \boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{D} = \boldsymbol{\sigma}' : \nabla \mathbf{u}. \quad (3.42)$$

Considere agora as seguintes identidades vetoriais

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}') = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}' + \mathbf{u}' \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.43)$$

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) = \boldsymbol{\sigma}' : \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}', \quad (3.44)$$

assim, substituindo a equação (3.43) e (3.44) em (3.42) e aplicando o resultado na equação (3.41), obtém-se a forma diferencial do teorema da reciprocidade de Lorentz dado na equação (3.36).

Observa-se que na ausência de força de campo $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' = 0$, o teorema da reciprocidade de Lorentz reduz-se a

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}'). \quad (3.45)$$

Integrando a equação (3.36) em uma região regular V de um fluido Newtoniano incompressível, obtém-se a representação integral do teorema da reciprocidade de Lorentz, dado por

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV - \int_V \mathbf{u}' \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV = \int_V \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}') dV - \int_V \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}') dV. \quad (3.46)$$

Novamente na ausência de força de campo e aplicando o teorema da divergência no primeiro termo do lado esquerdo e no primeiro termo do lado direito da equação (3.46), segue-se que

$$\int_S \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.47)$$

O teorema da reciprocidade de Lorentz ou simplesmente identidade Recíproca, pode ser utilizado para demonstrar propriedades de simetria do escoamento de Stokes, como a simetria da matriz resistência \mathbf{R} (Kim e Karrila, 1991). Além disso, em conjunto com a solução fundamental das equações de Stokes constituem a base para determinação das forças que agem sobre as partículas que interagem hidrodinamicamente quando se deslocam em um fluido viscoso.

3.4 Representação Integral do Escoamento de Stokes

De acordo com a versão diferencial do teorema recíproco, no caso da não existência de força de campo, tem-se que

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 0, \quad (3.48)$$

em que, $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ é a solução do campo de velocidade e tensões de um escoamento de Stokes arbitrário e $(\mathbf{u}', \boldsymbol{\sigma}')$, representam a solução do campo de velocidade e tensões de um escoamento, sendo neste caso a solução fundamental das equações de Stokes. Aplicando a versão diferencial do teorema recíproco, equação (3.48), em conjunto com a solução fundamental, obtém-se que

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{8\pi} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\mathcal{T}} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{8\pi\eta} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\mathcal{G}} \right) = 0. \quad (3.49)$$

Considere agora duas possibilidades para a integração da (3.49) em todo volume V do fluido. Primeiramente, suponha que a singularidade geradora de distúrbio no campo de velocidade do fluido, não se encontra no interior de V . Dessa forma, a função da equação (3.49) é regular em V . Conseqüentemente, todo o volume V , por ser uma região simplesmente conexa, pode ser reduzido a um ponto, preservando os contornos físicos. Portanto, tem-se que

$$\int_V \nabla \cdot (\eta \boldsymbol{\mathcal{T}} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{G}}) dV = 0. \quad (3.50)$$

Aplicando o teorema da divergência em (3.50), obtém-se que

$$\int_S \eta \boldsymbol{\mathcal{T}} \cdot \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \int_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{G}} \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (3.51)$$

Considere agora a segunda possibilidade. Neste caso, o ponto de singularidade encontra-se no interior de V . Como mostrado na figura (3.1)

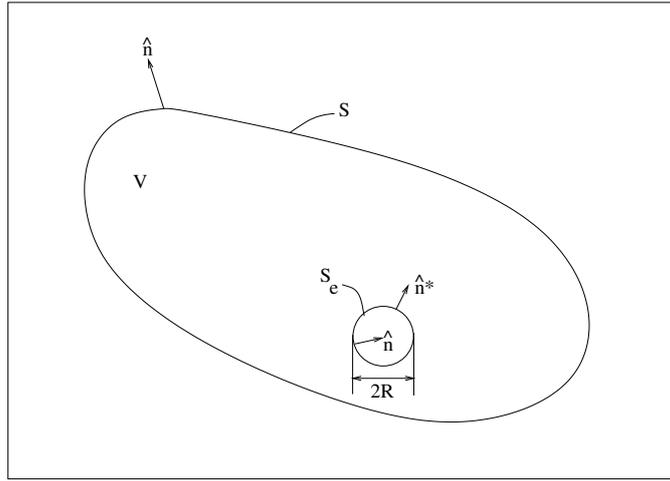


Figura 3.1: Esquemática para a segunda possibilidade.

Observe que a equação (3.49) é regular no volume $V - V_e$, em que V_e é o volume da esfera de raio R . Assim, segue-se que

$$\int_{V-V_e} \nabla \cdot (\eta \mathcal{T} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{G}) dV = 0. \quad (3.52)$$

Novamente, aplicando o teorema da divergência na equação (3.52), tem-se que

$$\int_{S-S_e} \eta \mathcal{T} \cdot \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{S-S_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{G} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (3.53)$$

em que, S_e é a superfície da esfera. Avalindo as integrais (3.53), chega-se na seguinte expressão para o vetor velocidade de uma singularidade em \mathbf{x}_0 , dado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi\eta} \int_S \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} dS - \frac{1}{8\pi} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathcal{T}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} dS. \quad (3.54)$$

3.5 Lei de Faxén

Para o desenvolvimento da matriz mobilidade global, que descreve as interações hidrodinâmica entre todas as partículas numa suspensão, utiliza-se da Lei de Faxén, que determina a força hidrodinâmica sobre uma partícula esférica no domínio de um fluido. Suponha-se inicialmente, que antes da introdução de uma partícula esférica rígida, a distribuição de velocidade em um domínio de fluido seja $\mathbf{u}_\infty(\mathbf{x})$. Aplicando-se ao fluido uma distribuição

superficial de força de densidade $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ em uma superfície esférica S_α de raio a_α , centrada em \mathbf{x}_0 , sua distribuição inicial de velocidade mudará. Desse modo, pela representação integral do escoamento de Stokes para uma partícula rígida, a velocidade adicional $\mathbf{u}'(\mathbf{x})$ no ponto \mathbf{x} devida á distribuição de força de densidade superficial \mathbf{t} , é dada por

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi\eta} \int_{S_\alpha} \boldsymbol{\mathcal{G}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}'). \quad (3.55)$$

Pelo princípio da superposição, o campo total $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, é dado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\eta} \int_{S_\alpha} \boldsymbol{\mathcal{G}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}'). \quad (3.56)$$

Consideremos o caso mais geral de uma esfera rígida que translada com velocidade \mathbf{U} e gira em torno de seu centro com velocidade angular $\boldsymbol{\omega}$. Assim, na superfície da esfera S_α o escoamento satisfaz a seguinte condição de contorno

$$\mathbf{U} + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\eta} \int_{S_\alpha} \boldsymbol{\mathcal{G}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}'). \quad (3.57)$$

Integrando a equação (3.57) na superfície da esfera, tem-se que

$$\begin{aligned} \int_{S_\alpha} \mathbf{U} dS(\mathbf{x}') + \int_{S_\alpha} \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) dS(\mathbf{x}') &= \int_{S_\alpha} \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}') \\ &- \frac{1}{8\pi\eta} \int_{S_\alpha} \left[\int_{S_\alpha} \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}') \right] dS(\mathbf{x}') \end{aligned} \quad (3.58)$$

em que $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ e $r = |\mathbf{x}|$. Resolvendo a equação (3.58) para \mathbf{F} , observando que

$$\mathbf{F} = \int_{S_\alpha} \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}'), \quad (3.59)$$

segue-se que a força total na superfície da esfera é dado por

$$\mathbf{F} = \frac{3\eta}{2a} \int_{S_\alpha} [\mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}') - \mathbf{U}] dS(\mathbf{x}'). \quad (3.60)$$

Para resolver a integral (3.60), será considerado o efeito do tamanho finito da partícula, dessa forma aplicando-se a expansão multipolo de $\mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}')$ em torno do centro \mathbf{x}_0 da esfera, chega-se a seguinte expressão

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}') &= \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) + \\
&+ \frac{1}{2} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) + \dots
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Integrando a equação (3.61) na superfície da esfera S_α , obtém-se

$$\begin{aligned}
\int_{S_\alpha} \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}') dS &= \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) 4\pi a^2 + \left[\int_{S_\alpha} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) dS \right] \cdot \nabla \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) + \\
&+ \frac{1}{2} \left[\int_{S_\alpha} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) dS \right] : \nabla \nabla \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) + \dots
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Observando que para escoamentos de Stokes o termo $\nabla^{2n+2} \mathbf{u}_\infty = 0$ para $n = 1, 2, \dots$, e que as integrais abaixo apresentam os seguintes resultados

$$\int_{S_\alpha} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) dS = \mathbf{0} \quad \text{e} \quad \int_{S_\alpha} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) dS = \frac{4}{3} \pi a^4 \mathbf{I}, \tag{3.63}$$

segue-se, por meio da substituição destes resultados em (3.60), obtém-se a seguinte expressão da primeira lei de Faxén para a translação de uma esfera rígida, dada por

$$\mathbf{F} = 6\pi\eta a \left[\left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}_\infty(\mathbf{x}_0) - \mathbf{U} \right]. \tag{3.64}$$

3.6 Formulação Mobilidade e o Tensor Mobilidade de Rotne-Prager

Nesta seção, será utilizada a Lei de Faxén para desenvolvimento da matriz mobilidade global. Este resultado determina a força exercida por uma esfera α de raio a_α sobre o fluido. Dessa forma, podemos escrever a equação (3.64) como

$$\mathbf{F}_\alpha = 6\pi\eta a_\alpha \left[\mathbf{U}_\alpha - \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}'(\mathbf{x}_\alpha) \right], \tag{3.65}$$

em que \mathbf{u}' é o campo de velocidade resultante do escoamento induzido pelo movimento das outras partículas da suspensão, no qual a partícula α está imersa com uma velocidade \mathbf{U}_α .

Para sistemas diluídos o campo \mathbf{u}' é determinado aplicando o princípio da superposição, devido à linearidade das equações de Stokes, nos distúrbios de primeira ordem induzidos por cada partícula $\beta \neq \alpha$ na suspensão, obtendo-se

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{8\pi\eta} \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2\right) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\beta) \cdot \mathbf{F}_\beta, \quad (3.66)$$

em que $\mathcal{G}(\mathbf{r})$ é o tensor de Oseen-Burgers com $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_\beta$. Substituindo a equação (3.66) na equação (3.65), obtém-se a expressão para a força induzida na esfera α devido ao campo de velocidades provocado por outras esferas β se movendo na mesma suspensão. Dessa forma, segue-se que

$$\mathbf{F}_\alpha = 6\pi\eta a_\alpha \mathbf{I} \cdot \left[\mathbf{U}_\alpha - \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{\beta=1}^N \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2\right) \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2\right) \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_\beta \right], \quad (3.67)$$

com $\alpha = 1, \dots, N$ e $\mathbf{r} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$. Por meio da equação (3.67), pode-se definir o seguinte tensor mobilidade de pares, dado por

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2\right) \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2\right) \mathcal{G}(\mathbf{r}). \quad (3.68)$$

Utilizando a propriedade $\nabla^2 \nabla^2 \mathcal{G} = 0$ e a relação

$$\nabla^2 \mathcal{G}(\mathbf{r}) = \frac{2}{r^3} \mathbf{I} - \frac{6}{r^5} \mathbf{r}\mathbf{r}, \quad (3.69)$$

o tensor $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ se apresenta como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{1}{3r^3} (a_\alpha^2 + a_\beta^2) [\mathbf{I} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\}. \quad (3.70)$$

Este tensor é denominado tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969) e descreve as interações hidrodinâmicas de longo alcance entre as partículas α e β . Este tensor depende apenas da configuração do sistema particulado em dado instante de tempo e possui decaimento lento, ou de longo alcance, da ordem de $1/r$. Para uma suspensão monodispersa, ou seja, $a_\alpha = a_\beta = a$ o tensor mobilidade de Rotne-Prager pode ser escrito como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{2}{3r^3} a^2 [\mathbf{I} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\}. \quad (3.71)$$

Para o desenvolvimento do tensor mobilidade global, primeiramente será definido dois tensores \mathbf{M}^s e \mathbf{M}^p , denominados, respectivamente, por tensores automobilidade e mobilidade entre pares, cujas as componentes são dadas por

$$M_{\alpha\alpha,ij}^s = \frac{\delta_{ij}}{6\pi\eta a}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (3.72)$$

e

$$M_{\alpha\beta,ij}^p = G_{ij}^{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N \quad \alpha \neq \beta. \quad (3.73)$$

Assim, a equação (3.67) após o isolamento do termo \mathbf{U}_α , pode ser escrita como

$$\mathbf{U}_\alpha = \mathbf{M}^s \cdot \mathbf{F}_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta, \beta=1}^N \mathbf{M}^p \cdot \mathbf{F}_\beta. \quad (3.74)$$

Dessa forma, define-se \mathbf{M} , a matriz mobilidade global, como a soma das matrizes ou tensores automobilidade e mobilidade entre pares, de modo que

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^s + \mathbf{M}^p, \quad (3.75)$$

e portanto, a equação (3.74) pode ser expressa de forma resumida, como

$$\mathbf{U} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{F}. \quad (3.76)$$

A equação (3.76) é escrita em forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{U}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \cdots & \mathbf{M}_{1N} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \cdots & \mathbf{M}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{M}_{N1} & \mathbf{M}_{N2} & \cdots & \mathbf{M}_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_N \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

em que $\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \dots, \mathbf{U}_N$ denota as velocidades das partículas $1, 2, \dots, N$. Os tensores \mathbf{M}_{ij} para $i = 1, \dots, N$ e $j = 1, \dots, N$, dependem da configuração da suspensão. Os elementos \mathbf{M}_{ii} da diagonal da matriz, são responsáveis por acoplar o efeito das forças atuantes em cada partícula α da suspensão em sua própria velocidade. Os elementos \mathbf{M}_{ij} para $i \neq j$, representam as perturbações nas velocidades das partículas $\alpha \neq \beta$ devido a uma força \mathbf{F}_β atuante em cada partícula β .

3.7 Mobilidades de Beenakker e Interações Hidrodinâmicas Periódicas

A primeira formulação do tensor de mobilidade \mathbf{M}^{ij} para o cálculo de interações hidrodinâmicas de longo alcance em um sistema particulado de partículas esféricas sólidas foi

proposta por Rotne-Prager (1969). Devido ao problema clássico, nos sistemas particulados, relacionado ao decaimento lento das interações hidrodinâmicas de longo alcance na ordem de $1/r$, com o aumento da distância de separação entre as partículas, o cálculo direto dessas somas usando o tensor de Rotne-Prager leva a divergências numéricas associadas ao pequeno tamanho da suspensão. Para realizar o cômputo das interações hidrodinâmicas o mais preciso possível e contornar esse problema de convergência, foi usada a técnica de somas de Ewald aplicada ao tensor de Rotne-Prager, considerando a suspensão com condições de contornos periódicos e replicando-a em todas as direções do espaço. Beenakker (1986) foi o primeiro a aplicar essa técnica das somas de Ewald para problemas de interações hidrodinâmicas empregando o tensor de Rotne-Prager. Essa soma periódica pode ser eficientemente computada com uma técnica de soma bem conhecida proposta por Ewald-Beenakker.

Seja representar o tensor mobilidade de Rotne-Prager em termos de uma soma sobre a *lattice* \mathcal{L}

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}' + \mathbf{x}), \quad (3.78)$$

em que $\mathbf{r}' = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$ é a separação entre as partículas α e β no interior da célula unitária ou central.

Devido ao problema de convergência associado ao lento decaimento das funções de Green, a soma representada na equação (3.78) deverá ser transformada em uma forma convergente. Dessa forma, é necessário aplicar as mobilidades hidrodinâmicas de Beenakker (1986). Assim, considere a seguinte representação alternativa do tensor de Rotne-Prager dado na equação (3.71) aplicado ao problema de interações hidrodinâmicas em suspensões monodispersas

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla\nabla)r. \quad (3.79)$$

O tensor $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ pode ser expresso, como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \mathbf{G}^1(\mathbf{r}) + \mathbf{G}^2(\mathbf{r}), \quad (3.80)$$

sendo

$$\mathbf{G}^1(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla\nabla)\{r[1 - \text{erf}(\xi r)]\} \quad (3.81)$$

e

$$\mathbf{G}^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2\mathbf{I} - \nabla\nabla)\{r[\text{erf}(\xi r)]\}, \quad (3.82)$$

em que ξ é um parâmetro positivo de controle de convergência do método denotado por $\xi = \pi^{1/2}V^{-1/3}$, V é o volume da célula central e $\text{erf}(x)$ é a função erro, definida por

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (3.83)$$

Assim, a mobilidade periódica $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ pode ser escrita da seguinte forma

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}' + \mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^2(\mathbf{r}' + \mathbf{x}). \quad (3.84)$$

Em termos de convergência, conforme Beenakker (1986), a série \mathbf{G}^1 converge mais rapidamente no espaço físico, enquanto a série \mathbf{G}^2 converge mais rápido no espaço recíproco (ou de Fourier). Dessa forma, a soma de \mathbf{G}^2 será representada em uma soma sobre a *lattice* denotada por $\hat{\mathcal{L}}$ no espaço recíproco, através da transformação de Ewald, definida por (Born e Huang, 1954)

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \varphi(\mathbf{x}) = V^{-1} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}} \hat{\varphi}(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'), \quad (3.85)$$

no qual, a transformada de Fourier da função φ é dada por

$$\hat{\varphi}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (3.86)$$

Assim, a equação (3.84) pode ser representada em termos de uma soma no espaço físico e outra soma no espaço recíproco, por

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}' + \mathbf{x}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathbf{G}^2(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'), \quad (3.87)$$

em que os tensores mobilidades \mathbf{G}^1 e \mathbf{G}^2 são dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}) &= \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \left(\frac{16}{3}\xi^7 a^2 r^4 + 4\xi^3 r^2 - \frac{80}{3}\xi^5 a^2 r^2 - 6\xi + \frac{56}{3}\xi^3 a^2 + \frac{4}{3}\xi \frac{a^2}{r^2} \right) \right. \\ &\times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\xi^2 r^2) + \left(\frac{1}{r} + \frac{2a^2}{3r^3} \right) \text{erfc}(\xi r) \left. \right\} \mathbf{I} \\ &+ \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \left(-\frac{16}{3}\xi^7 a^2 r^4 - 4\xi^3 r^2 + \frac{64}{3}\xi^5 a^2 r^2 + 2\xi - \frac{8}{3}\xi^3 a^2 - 4\xi a^2 - 4\xi \frac{a^2}{r^2} \right) \right. \\ &\times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\xi^2 r^2) + \left(\frac{1}{r} - \frac{2a^2}{r^3} \right) \text{erfc}(\xi^2 r^2) \left. \right\} \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (3.88)$$

e

$$\mathbf{G}^2(\mathbf{k}) = \left(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \right) \left(1 - \frac{1}{3}a^2k^2 \right) \left(1 + \frac{1}{4}\xi^2k^2 + \frac{1}{8\xi^4}k^4 \right) \frac{1}{\eta k^2} \exp\left(\frac{-k^2}{4\xi^2} \right), \quad (3.89)$$

em que $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ e $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$, é a função complementar de $\operatorname{erf}(x)$. Assim, as matrizes mobilidades periódicas, entre pares e automobilidade, podem ser expressas respectivamente, por

$$\mathbf{M}_{\alpha\beta}^p = \mathbf{G}^{\alpha\beta} \quad (3.90)$$

e

$$\mathbf{M}_{\alpha\alpha}^s = \left(\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{\eta}\xi\pi^{-3/2} + \frac{20}{9\eta}\xi^3\pi^{-3/2}a^2 \right) \mathbf{I}. \quad (3.91)$$

Portanto, a formulação completa para a solução da evolução dinâmica de uma suspensão magnéticas com interações magnéticas e interações hidrodinâmicas periódicas, é dada por (Gontijo, 2013)

$$\mathbf{U}_\alpha = \mathbf{M}^s \cdot \mathbf{F}_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta, \beta=1}^N \mathbf{M}^p \cdot \mathbf{F}_\beta, \quad (3.92)$$

em que

$$\mathbf{F}_\alpha = \mathbf{f}_g^\alpha + \mathbf{f}_b^\alpha + \mathbf{f}_m^\alpha + \mathbf{f}_r^\alpha + \mathbf{f}_c^\alpha, \quad (3.93)$$

sendo, \mathbf{f}_g^α uma força gravitacional que atua na partícula α , \mathbf{f}_b^α representa uma força browniana atuante na partícula α , \mathbf{f}_m^α representa a força magnética atuante na partícula α , sendo a soma de uma força de interação campo-partícula e uma força de interação partícula-partícula, \mathbf{f}_r^α e \mathbf{f}_c^α representam respectivamente a força de repulsão e contato detalhado anteriormente. A posição de cada partícula é determinada por

$$\frac{d\mathbf{x}_\alpha}{dt} = \mathbf{U}_\alpha, \quad (3.94)$$

após o cômputo da velocidade. No passo de tempo posterior, para a evolução no tempo dos momentos de dipolo, é essencial a resolução da equação evolutiva do momento angular de cada partícula, dada por

$$\boldsymbol{\omega}_\alpha = \frac{1}{8\pi\eta a^3} (\mathbf{T}_b + \mathbf{T}_m), \quad (3.95)$$

em que \mathbf{T}_b é o torque browniano dado no resultado (2.38) e \mathbf{T}_m é o torque magnético que age sobre cada partícula α devido as interações entre momentos de dipolo das partículas e

interações entre partícula e o campo externo aplicado. Com a determinação da velocidade angular de cada partícula, o momento de dipolo para cada partícula α é determinado por

$$\frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{d}}^\alpha) = \boldsymbol{\omega}_\alpha \times \hat{\mathbf{d}}^\alpha, \quad (3.96)$$

no qual, $\hat{\mathbf{d}}^\alpha$ é o vetor unitário na direção do momento da partícula α .

As forças apresentadas em (3.93) foram detalhadas no capítulo (3) juntamente com suas formas adimensionais, denotadas nas equações (2.111)-(2.116). As matrizes mobilidades entre pares e automobilidades são expressas adimensionalmente por

$$\widetilde{\mathbf{M}}^s = \frac{1}{6\pi\eta a} \mathbf{M}^s, \quad \widetilde{\mathbf{M}}^p = \frac{1}{6\pi\eta a} \mathbf{M}^p. \quad (3.97)$$

CAPÍTULO 4

SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA DO FLUIDO MAGNÉTICO

As informações sobre a dinâmica da magnetização de um fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório são fornecidas por meio das medidas de suas partes real e imaginária da susceptibilidade complexa $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$. A parte real χ' da susceptibilidade complexa está relacionada com o armazenamento de energia de campo magnético, enquanto a parte imaginária χ'' está relacionada com a dissipação de energia e geração de calor.

4.1 Susceptibilidade Complexa: Abordagem Numérica

A susceptibilidade complexa de um fluido magnético $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ pode ser calculada através da série temporal da componente de magnetização na direção do campo. A transformada de Fourier seno e cosseno do sinal de magnetização $M_z(t)$ fornece os coeficientes de Fourier $\chi'(\omega)$ da componente em fase e $\chi''(\omega)$ da componente fora de fase com o campo magnético oscilatório aplicado, dado por

$$\mathbf{H} = H_0 \hat{\mathbf{e}}_z \sin(\omega t), \quad (4.1)$$

em que, H_0 e ω são a amplitude do campo e frequência angular, respectivamente, z é a direção do campo aplicado.

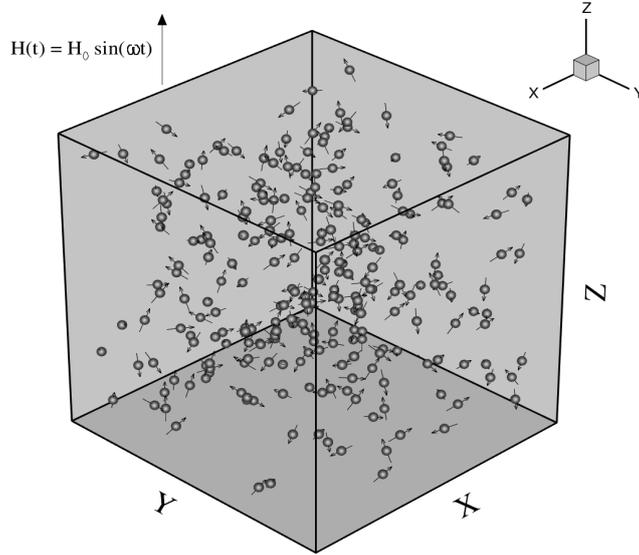


Figura 4.1: *Box* com partículas suspensas em um fluido submetidas a um campo magnético oscilatório aplicado.

Foi aplicado nas simulações o método dinâmica de Langevin para determinar, a cada tempo de simulação (t_k), a média do conjunto da componente do momento dipolar na direção z das partículas i , ou seja, m_z^i . A média do conjunto denotada por $\langle m_z^i(t_k) \rangle$ é baseada em estatísticas sobre um número suficientemente grande de realizações de simulação até que os resultados tenham atingido um nível de precisão que se considera aceitável. Uma vez calculada a evolução temporal da magnetização $M_z(t) = \langle m_z^i(t_k) \rangle$, pode ser realizado o cálculo numérico das componentes da susceptibilidade complexa usando o seguinte par de transformada de Fourier (Berkov et al., 2009):

$$\chi'(\omega) = \chi_s \frac{1}{T} \int_0^T M_z(t) \sin(\omega t) dt \quad \text{e} \quad \chi''(\omega) = \chi_s \frac{1}{T} \int_0^T M_z(t) \cos(\omega t) dt, \quad (4.2)$$

em que T é um múltiplo de $2\pi/\omega$ e χ_s é a susceptibilidade de saturação, definida por

$$\chi_s = \frac{M_s}{H_0}. \quad (4.3)$$

Para aplicação de χ_s nos cálculos da susceptibilidade complexa, considerou-se valores típicos obtidos de fluidos magnéticos. Dessa forma, estimou-se $M_d \sim 10^5 \text{ Am}^{-1}$ e $H_0 \sim 10^3 \text{ Am}^{-1}$ para $\alpha = 1$. Assim, por exemplo, para $\phi = 0.1$ e $\alpha = 1$ tem-se que $\chi_s = M_s/H_0 = \phi M_d/H_0 = 10$. Para $\phi = 0.1$ e $\alpha = 5$, obtém-se $\chi_s = 10/5$. Também para $\phi = 0.02$ e $\alpha = 1$, chega-se em $\chi_s = 2$. Portanto, partindo desses valores típicos, a equação (4.3) pode ser expressa em função de ϕ e α , como

$$\chi_s = 100 \times \frac{\phi}{\alpha}, \quad (4.4)$$

em que $\alpha = \mu_0 m_d H_0 / k_B \theta_0$. As integrais (4.2) também podem ser avaliadas numericamente por uma forma discreta, dadas por

$$\chi'(\omega) = \frac{\chi_s}{N_T} \sum_{k=1}^{N_T} M_z(t_k) \text{sen}(\omega t_k) \quad \text{e} \quad \chi''(\omega) = \frac{\chi_s}{N_T} \sum_{k=1}^{N_T} M_z(t_k) \text{cos}(\omega t_k), \quad (4.5)$$

em que N_T é um número suficientemente grande de passo de tempo nas simulações numéricas.

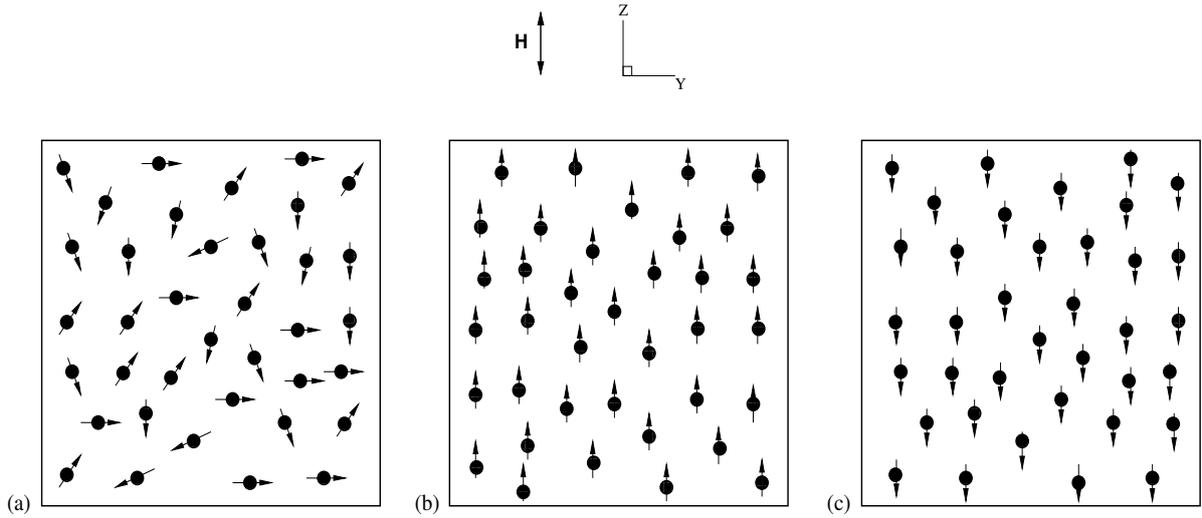


Figura 4.2: Desenhos esquemáticos das configurações da suspensão magnética considerando três tempos diferentes. Figura (a) para $t = 0$, cada partícula da suspensão possui momento de dipolo alinhado em uma direção aleatória. Figura (b) e Figura (c) para $t = t_1$ e $t = t_2$ respectivamente, representam os alinhamentos dos momentos dipolares das partículas na direção do campo magnético oscilatório.

Sem perda de generalidade, os resultados obtidos referente a parte imaginária da susceptibilidade complexa foram expressos somente em valores absolutos. A figura (4.3), mostra

o resultado da magnetização de equilíbrio em função do tempo, devido à aplicação de um campo magnético estático, e uma magnetização oscilante após a implementação do campo magnético oscilatório descrito em (4.1). As simulações foram realizadas considerando 300 partículas e 50 realizações, ambas sem interações hidrodinâmicas.

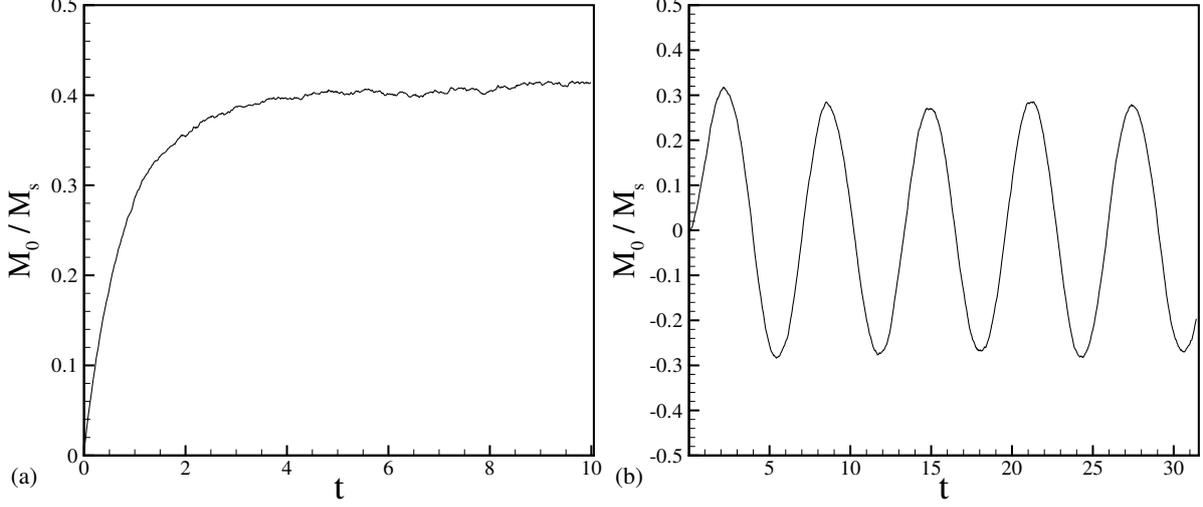


Figura 4.3: Figura (a), magnetização de equilíbrio em função do tempo de um fluido magnético exposto a um campo magnético externo estático, considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Figura (b), magnetização de equilíbrio oscilante, após à aplicação de um campo magnético oscilatório, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$.

4.2 Susceptibilidade Complexa: Abordagem Analítica

O cálculo da parte real e imaginária da susceptibilidade complexa, caso analítico, de um fluido magnético linearmente polarizado por um campo magnético oscilatório, foi obtido para o limite assintótico de fluido magnético diluídos e semi-diluídos ou seja para $0 < \phi \leq 0.10$. Esses cálculos assintóticos de χ' e χ'' foram apresentados por Berkov et al. (2009). Basicamente, esses autores calculam as componentes da suscetibilidade complexa expressas nas integrais em (4.2) usando uma função de magnetização adimensional dependente do tempo, dada assintoticamente por

$$M_z(\alpha_e(t)) = \mathcal{L}(\alpha_e(t)) + 8\phi\lambda\mathcal{L}(\alpha_e(t))\mathcal{L}'(\alpha_e(t)), \quad (4.6)$$

no qual $\mathcal{L}(\alpha_e(t))$ é a equação clássica de Langevin $\mathcal{L}(x) = \coth(x) - 1/x$ com $\mathcal{L}'(x) = d\mathcal{L}(x)/dx$ e $\alpha_e = \mu_0 m_d H_e / k_B \theta_0$. O campo magnético efetivo adimensional α_e sendo parte da solução, é determinado pela resolução da seguinte equação diferencial ordinária não linear:

$$\frac{d\alpha_e}{dt} = -\mathcal{D}_r \left[\frac{A(\alpha_e) - B(\alpha_e)}{J(\alpha_e)} (\alpha_e - \alpha \sin(\omega t)) \right], \quad (4.7)$$

em que as funções $A(\alpha_e)$, $B(\alpha_e)$ e $J(\alpha_e)$, são definidas como

$$A(\alpha_e) = 1 - \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e} + 8\phi\lambda[\mathcal{L}^2(\alpha_e) - C(\alpha_e)] \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e}, \quad (4.8)$$

$$B(\alpha_e) = C(\alpha_e) + 8\phi\lambda[\mathcal{L}^2(\alpha_e) - C(\alpha_e)] \frac{\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e}, \quad (4.9)$$

$$J(\alpha_e) = \mathcal{L}'(\alpha_e) + 8\phi\lambda [(\mathcal{L}''(\alpha_e))^2 + \mathcal{L}(\alpha_e)\mathcal{L}''(\alpha_e)], \quad (4.10)$$

no qual,

$$C(\alpha_e) = 1 - \frac{3\mathcal{L}(\alpha_e)}{\alpha_e}, \quad e \quad \alpha = \frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B \theta_0}. \quad (4.11)$$

Para a adimensionalização da equação (4.7), foram utilizadas as seguintes escalas características, dadas por

$$\tilde{t} = \frac{t\mathcal{D}_t}{a} \quad e \quad \tilde{\omega} = \frac{\omega a}{U_s}. \quad (4.12)$$

Substituindo os termos de (4.12) em (4.7), obtém-se que

$$\frac{U_s}{a} \frac{d\alpha_e}{d\tilde{t}} = -\mathcal{D}_r \left[\frac{A(\alpha_e) - B(\alpha_e)}{J(\alpha_e)} (\alpha_e - \alpha \sin(\tilde{\omega}\tilde{t})) \right]. \quad (4.13)$$

Dividindo a equação (4.13) por a/U_s e suprimindo sem perda de generalidade a notação adimensional \sim , tem-se que

$$\frac{d\alpha_e}{dt} = -\frac{3}{4Pe} \left[\frac{A(\alpha_e) - B(\alpha_e)}{J(\alpha_e)} (\alpha_e - \alpha \sin(\omega t)) \right]. \quad (4.14)$$

Dessa forma, resolvendo numericamente a equação (4.14) e substituindo em $M_z(\alpha_e(t))$ e posteriormente nas integrais dada em (4.2), obtém-se assintoticamente $\chi'(\omega)$ e $\chi''(\omega)$.

A figura (4.4), mostra a magnetização em função do tempo, para duas frequências angulares diferentes, o primeiro gráfico para $\omega = 1$ e o segundo para $\omega = 4$, ambas com fração volumétrica de partículas de $\phi = 0.10$. É importante destacar que os resultados

referentes as figuras (4.4) e (4.5) foram obtidos analiticamente, sendo válidos em limites assintóticos de baixos valores de ϕ sem a presença das interações hidrodinâmicas.

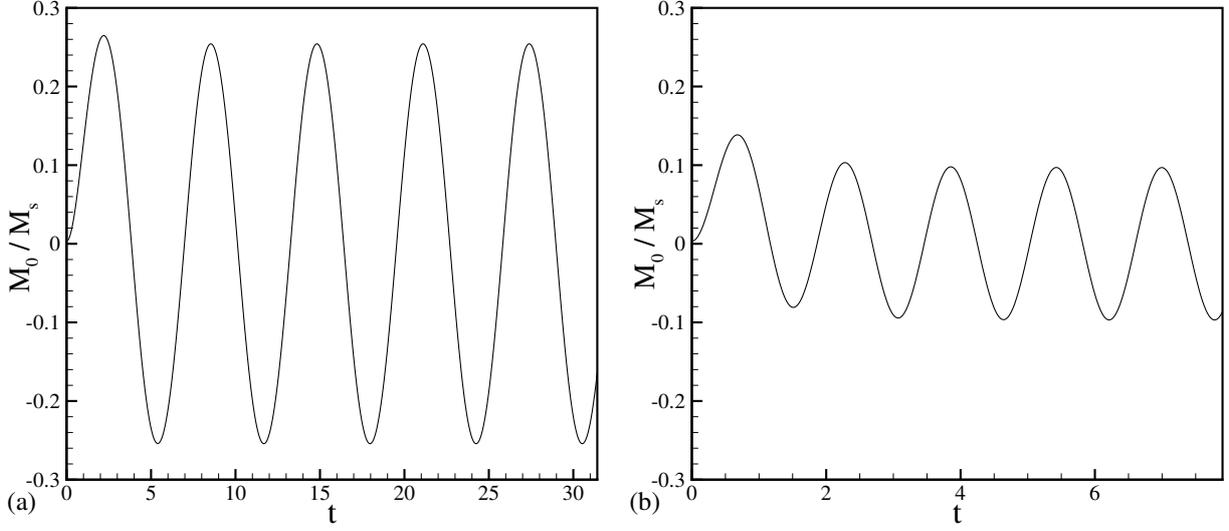


Figura 4.4: Magnetização oscilante devido à aplicação de um campo magnético externo oscilatório, modelo analítico de Berkov et al. (2009). Figura (a), foi considerado os parâmetros físicos com valores $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Na figura (b) considerou-se $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 4$.

A figura (4.5), apresenta a susceptibilidade complexa, destacando-se sua parte real e imaginária. Os resultados (a) e (b), foram encontrados com $\phi = 0.02$ e os resultados (c) e (d), para $\phi = 0.10$, todos com $\alpha = \lambda = 1$. Para o cômputo dos resultados analíticos para a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa, foi desenvolvido um código numérico em linguagem Fortran, de acordo com o desenvolvimento apresentado por Berkov et al. (2009). Para maiores detalhes veja Apêndice II.

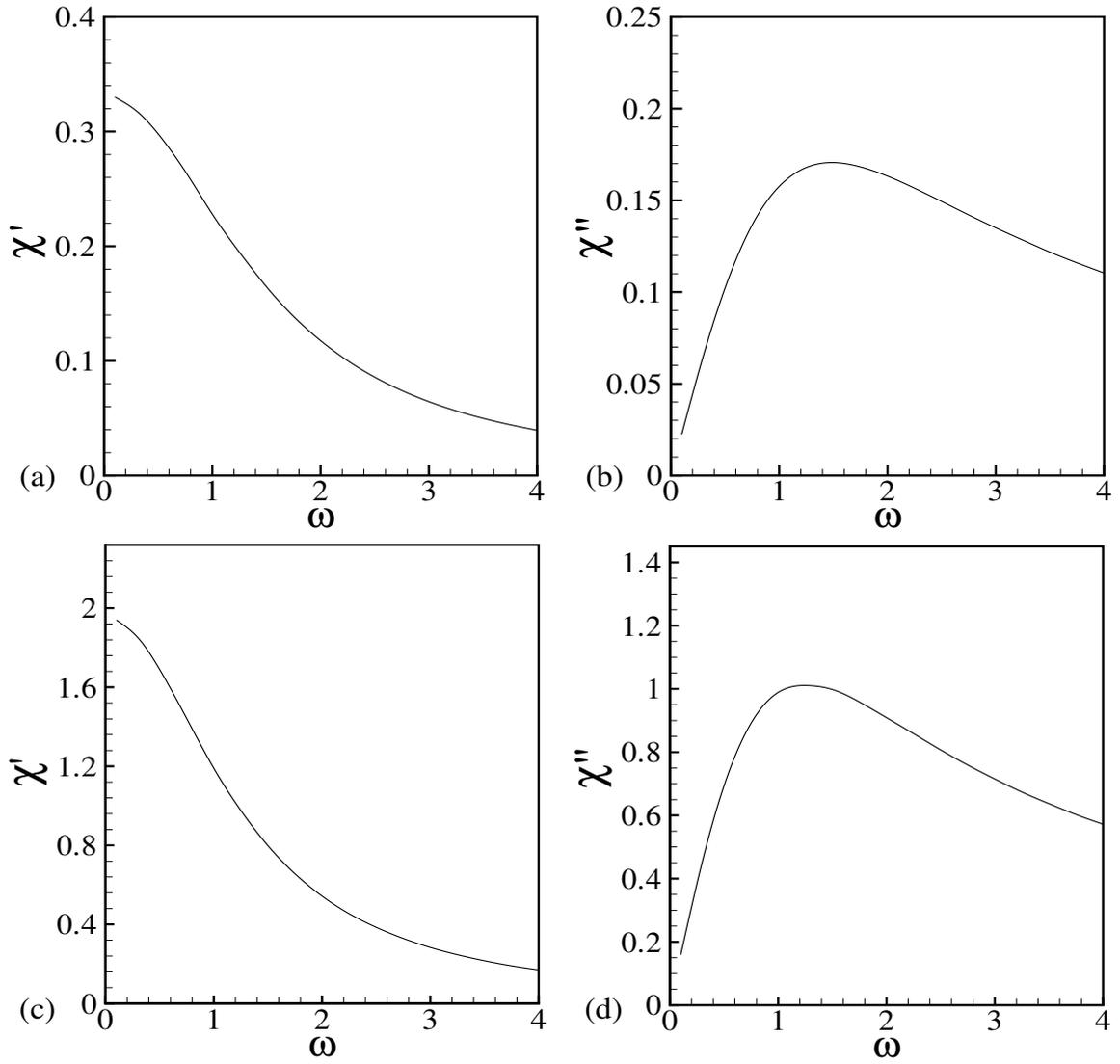


Figura 4.5: Susceptibilidade complexa do fluido magnético obtida através do modelo analítico de Berkov et al. (2009). Figura (a) e (b) representam a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular ω , considerado os parâmetros físicos com valores $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$. Na figura (c) e (d), parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular ω considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$.

4.3 Histerese Magnética

Dada uma curva \mathbf{M} em função de \mathbf{H} , a integral definida por

$$A = -\mu_0 \int_0^{T_p} \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}, \quad (4.15)$$

corresponde ao valor da área sob a curva em que T_p é o período do ciclo. Sendo esse valor diferente de zero, dizemos que o material magnético apresenta histerese. Assim, a histerese (figura 4.6) ocorre em decorrência da energia dissipada para inverter os dipolos magnéticos durante uma mudança de direção do campo magnético (Silva, 2015).

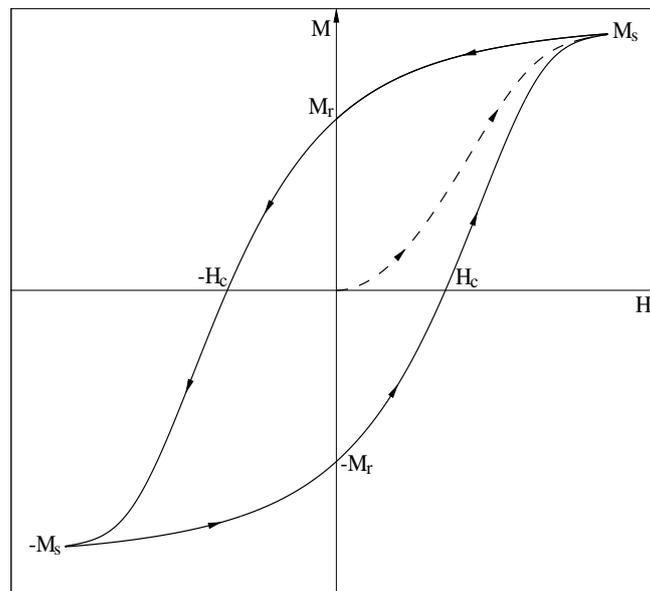


Figura 4.6: Curva de histerese magnética (caminho fechado) representada pela linha contínua. A linha tracejada representa a curva de magnetização inicial.

Segue-se de acordo com a figura (4.6) a magnetização é nula para o campo magnético nulo. Assim que a intensidade do campo oscilatório aplicado inicia-se e aumenta, a magnetização vai descrevendo o caminho representado pela linha pontilhada até atingir a magnetização de saturação M_s . Agora, ao diminuir o campo aplicado a partir de M_s , a magnetização vai descrevendo o caminho apresentado pela seta até atingir o ponto no eixo, denominado de magnetização remanente dado por M_r . Neste ponto, o campo magnético oscilatório aplicado é novamente igual a zero ($H = 0$), mas o material magnético possui

uma magnetização maior que zero ($M = M_r > 0$). Percorrendo agora o caminho no sentido oposto seguindo a seta, isto é, $H < 0$, chega-se ao ponto em que a magnetização novamente é nula ao se aplicar no sentido oposto um valor de campo magnético denominado, campo coercivo, dado por $-H_c$. Partindo deste ponto, ao aumentar-se novamente a intensidade do campo magnético no sentido oposto, seguindo a seta, a magnetização do material novamente atingirá a saturação do sentido oposto dada por $-M_s$. De forma análoga, aplicando novamente no sentido oposto, de acordo com a seta, a curva de histerese se fecha, delimitando uma área, no qual será mostrado que esta área sob a curva de histerese representa a dissipação de energia magnética na forma de calor. Portanto, a curva de histerese descreve o quanto de campo magnético (H_c) é necessário para desmagnetizar o material e o quanto de magnetização (M_r) permanece no sistema na ausência de campo externo aplicado (Rosensweig, 1985). Dessa forma, motivado por esse atraso da magnetização em relação ao campo externo oscilatório aplicado que o fenômeno recebeu o nome de histerese, que em grego significa atraso.

Considerando as partículas suficientemente grandes para aplicação das equações da termodinâmica, segue-se então da primeira lei que (Kappiyoor et al., 2010)

$$dU = dQ - dW, \quad (4.16)$$

em que dU é a variação da energia interna, dQ é o calor gerado na nanopartícula e dW é o trabalho realizado sobre a nanopartícula pelo campo magnético, sendo todos por unidade de volume e relativos a suspensão magnética. A variação da energia em um ciclo histerético, o estado final é igual ao inicial em um período T_p . Dessa forma, o sistema termodinâmico novamente se encontra em seu estado inicial. Em consequência disso, a variação de energia interna dU é nula, e todo o trabalho realizado nesse ciclo sobre o sistema é dissipado em forma de calor ΔQ . Portanto segue-se que

$$\Delta Q = \int_0^{T_p} dQ = \int_0^{T_p} dW. \quad (4.17)$$

De acordo com Rosensweig (2002), o trabalho realizado sobre o material magnético, quando colocado na presença de campos magnéticos oscilantes no tempo, é dado em sua forma diferencial por

$$dW = \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}, \quad (4.18)$$

em que $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$ é o campo de indução magnética. Substituindo o resultado (4.18) em (4.17), obtém-se que

$$\Delta Q = \int_0^{T_p} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}. \quad (4.19)$$

Considere agora a seguinte identidade vetorial com relação as diferenciais totais;

$$d(\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot d\mathbf{H}. \quad (4.20)$$

Portanto o segundo termo de (4.18) pode ser expresso como

$$\mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} = d(\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B} \cdot d\mathbf{H}. \quad (4.21)$$

Substituindo $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$ em (4.21), tem-se que

$$\mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} = d(\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) - \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} - \mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}. \quad (4.22)$$

Assim, aplicando o resultado (4.22) em (4.19), obtém-se que

$$\Delta Q = \int_0^{T_p} d(\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) - \mu_0 \int_0^{T_p} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} - \mu_0 \int_0^{T_p} \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}. \quad (4.23)$$

No ciclo, as duas primeiras integrais de (4.23) serão nulas. Dessa forma tem-se que

$$\Delta Q = -\mu_0 \int_0^{T_p} \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}. \quad (4.24)$$

Essa integral sendo a área sob a curva de histerese, representa a dissipação de calor por histerese. Isso ocorre devido ao movimento da magnetização em relação ao campo magnético oscilatório aplicado em um intervalo de tempo igual ao período de oscilação T_p . Portanto a equação (4.24) diz que quando o fluido magnético está sob ação de um campo magnético oscilatório, a área sob a curva de histerese nos dá a quantidade de energia dissipada na forma de calor por unidade de volume (Silva, 2015). Na literatura muitos artigos fazem uma separação entre perdas por histerese e perdas por relaxação magnética. Porém, de acordo com Carrey et al. (2011), todas as perdas térmicas de partículas magnéticas são perdas por histerese.

A equação (4.24) pode ser expressa em termos da parte imaginária da susceptibilidade complexa χ'' . Assim, considere um campo magnético aplicado variando no tempo dado por

$$\mathbf{H}(t) = (0, 0, H_0 \sin(\omega t)), \quad (4.25)$$

derivando (4.25) com relação ao tempo t , tem-se que

$$\frac{d\mathbf{H}}{dt} = (0, 0, \omega H_0 \cos(\omega t)), \quad (4.26)$$

substituindo (4.26) em (4.24), obtém-se

$$\begin{aligned} \Delta Q &= -\mu_0 \omega H_0 \int_0^{T_p} M(t) \cos(\omega t) dt \\ &= -\mu_0 \omega H_0^2 \frac{2\pi}{\omega} \frac{1}{H_0} \frac{1}{T_p} \int_0^{T_p} M(t) \cos(\omega t) dt \\ &= -2\pi \mu_0 H_0^2 \chi''(\omega). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Portanto, o calor dissipado por unidade de volume sendo a área da curva de histerese, é dado por

$$A = \Delta Q = -2\pi \mu_0 H_0^2 \chi''(\omega). \quad (4.28)$$

O resultado (4.28) nos diz que o calor dissipado num ciclo depende do quadrado da amplitude do campo magnético oscilatório aplicado e da parte imaginária da susceptibilidade complexa.

As partículas magnéticas, em uma dada temperatura, são ditas superparamagnéticas, se o tempo de relaxação dos momentos magnéticos (τ sendo τ_B ou τ_N) for menor que o tempo necessário para realizar uma medida (t_m) de análise do sistema, isto é, $\tau \ll t_m$. Em contraste, a partícula magnética é dita bloqueada, se $t_m < \tau$, dessa forma, os momentos de dipolo magnéticos não têm tempo de relaxar e o sistema apresenta histerese magnética.

A figura (4.7) mostra a variação do campo coercivo com o diâmetro da partícula magnética. Observa-se que existe de acordo com a figura (4.7), um diâmetro máximo dado por D_{max} no qual configura a mudança entre as partículas de monodomínio e multidomínio magnético. Para partículas magnéticas com diâmetros menores que o diâmetro crítico, isto é, $D < D_c$, possuem comportamento superparamagnético com o campo coercitivo nulo e ausência de histerese (Pankhurst et al., 2003; Cullity e Graham, 2009).

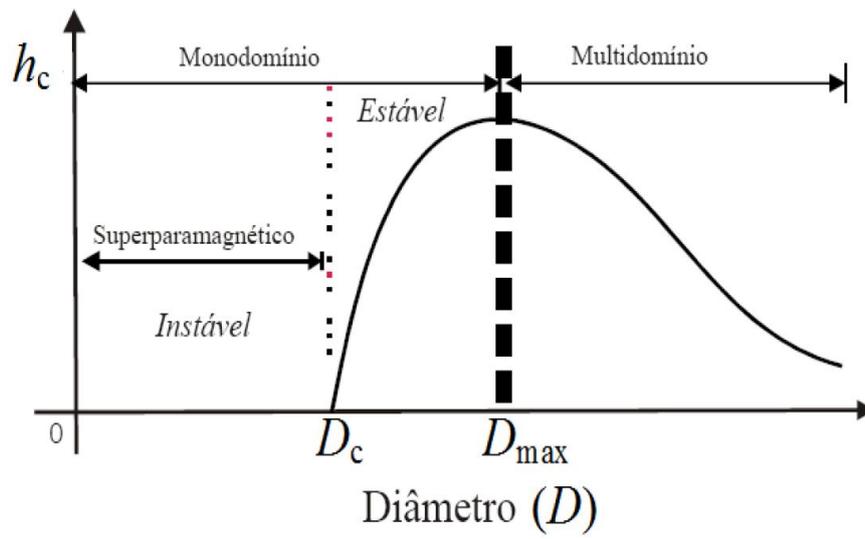


Figura 4.7: Comportamento do campo coercitivo com relação ao diâmetro da partícula (Leite, 2013).

CAPÍTULO 5

RESULTADOS NUMÉRICOS - MAGNETIZAÇÃO DE EQUILÍBRIO E SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA

Neste capítulo, serão apresentados os resultados numéricos preliminares. Na primeira seção é apresentado um estudo de modelos de magnetização de equilíbrio, baseado em simulações de muitos corpos com interações dipolares, validando o código para o caso de um campo magnético estático aplicado. Através dos resultados numéricos em conformidades com os resultados dos modelos assintóticos $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001). Na segunda seção, são apresentando os resultados numéricos sobre a influência das interações dipolares no comportamento da susceptibilidade complexa de um fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório externo. Na terceira seção do capítulo, são consideradas interações dipolares e hidrodinâmicas simultaneamente, e suas influências no comportamento da susceptibilidade complexa de um fluido magnético. Na quarta seção, são apresentados os resultados numéricos para vários números de Péclet diferentes. Por fim, na quinta seção, foram realizadas análises de curvas de histerese e a relação da área formada pela curva com a dissipação térmica.

Foi considerada em todas as simulações uma suspensão monodispersa de N partículas magnéticas esféricas rígidas de raio a , com momento de dipolo magnético permanente de $\mathbf{m} = m_d \mathbf{d}_i$, em que m_d é a intensidade do dipolo e \mathbf{d}_i é um vetor unitário de orientação dipolar. Essas partículas possuem densidade ρ_s e diâmetro d , imersas em um fluido newtoniano com viscosidade η e densidade ρ_f . Tomando as partículas magnéticas suficientemente grandes, para que o tempo de relaxação de Néel seja muito maior que o tempo de relaxação browniano, isto é $\tau_N \gg \tau_B$, dessa forma, as simulações da dinâmica de fluido magnético foram realizadas para o modelo de "dipolo fixo". O número de Stokes é o parâmetro de controle de inércia da partícula denotado por $St = mU_s/6\pi\eta a^2$, sendo definido como a razão entre o tempo de relaxação inercial ou de resposta da partícula $\tau_i = m/(6\pi\eta a)$, em que m é a massa da partícula e o tempo característico de sedimentação τ_S . Para fluidos magnéticos típicos o número de Stokes, $St \ll 1$. Portanto, os efeitos inerciais da partícula foram desprezados.

5.1 Estudos de Modelos de Magnetização

Para a simulação do sistema de partículas magnéticas utilizou-se o método numérico, conhecido por Dinâmica de Langevin. Neste método, é realizada a evolução temporal da suspensão magnética por meio da integração de suas equações, referentes ao movimento translacional e rotacional de cada partícula da suspensão, computando diretamente as interações magnéticas dipolares. A suspensão magnética é composta por N partículas esféricas, rígidas e de raio a , distribuídas randomicamente em uma célula central cúbica (*box*), com aresta de comprimento L .

Para realização das simulações, primeiramente foi feito um teste de convergência da magnetização com o tamanho do sistema. Para o cômputo das propriedades estatísticas do problema, o ideal seria um grande número de partículas ($N \sim 10^5$), mas o tempo de simulação tornaria inviável. Assim, um teste de convergência é necessário, para que se possa definir um número mínimo de partículas no sistema. E dessa forma, proporcionar uma representatividade de suas propriedades macroscópicas do fluido, com uma estatística significativa, a um custo computacional pertinente. Para verificar como o número de partícula influencia o valor de saturação numérico de magnetização, foi feita basicamente uma curva

da magnetização da suspensão magnética em função do número N de partículas conforme a figura (5.1). Foram realizadas diversas simulações para diferentes números de partículas, mantendo uma fração volumétrica igual a 15% com $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. Com esses parâmetros foram simuladas até 500 partículas com 50 realizações em cada simulação. Nota-se que a magnetização de equilíbrio satura e assume um valor aproximadamente constante para valores de $N \geq 300$. Dessa forma, $N = 300$ apresenta um erro percentual de aproximadamente 0,63% com relação a $N = 500$, além disso, respectivamente com um tempo de simulação em cerca de 30,16 hs e 79,19 hs. Nestas condições todas as simulações foram realizadas para um número de partículas de $N = 300$ e 50 realizações em cada simulação, no qual, mostrou-se boa convergência da magnetização e um custo computacional muito menor comparado com $N = 500$.

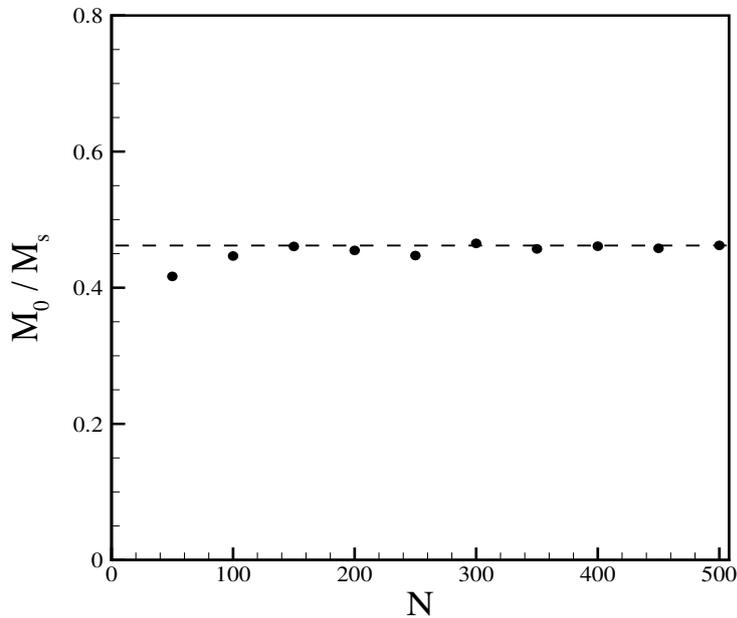


Figura 5.1: Magnetização de equilíbrio da suspensão em função do número de partícula N para $\phi = 15\%$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$.

Os resultados numéricos da magnetização de equilíbrio, com interações dipolares em uma suspensão magnética utilizando o método Dinâmica de Langevin com Somas de Ewald denotado simplesmente por (SE), foram comparados com o modelo clássico de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$ e os modelos de Ivanov e Kuznetsova (2001), que possuem respectivamente correção de ordem $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$. A figura (5.2), mostra o comportamento da magnetização em

função do parâmetro α , para uma fração volumétrica $\phi = 15\%$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Observa-se uma boa concordância entre os valores numéricos e os valores de Langevin e Ivanov-Kuznetsova (2001). Conforme o parâmetro α cresce, o campo magnético tende a dominar completamente o movimento das partículas, dessa forma, para $\alpha > 10$, todos os modelos convergem para os mesmos valores. Quando $\alpha \sim 1$ os modelos teóricos $\mathcal{O}(\phi^2)$, $\mathcal{O}(\phi^3)$, e o numérico, apresentaram uma maior magnetização com relação ao modelo de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$, que não considera interações dipolares de partículas. Dessa forma, interações dipolares acarretam um aumento na magnetização, devido as formações de cadeias de partículas na direção do campo.

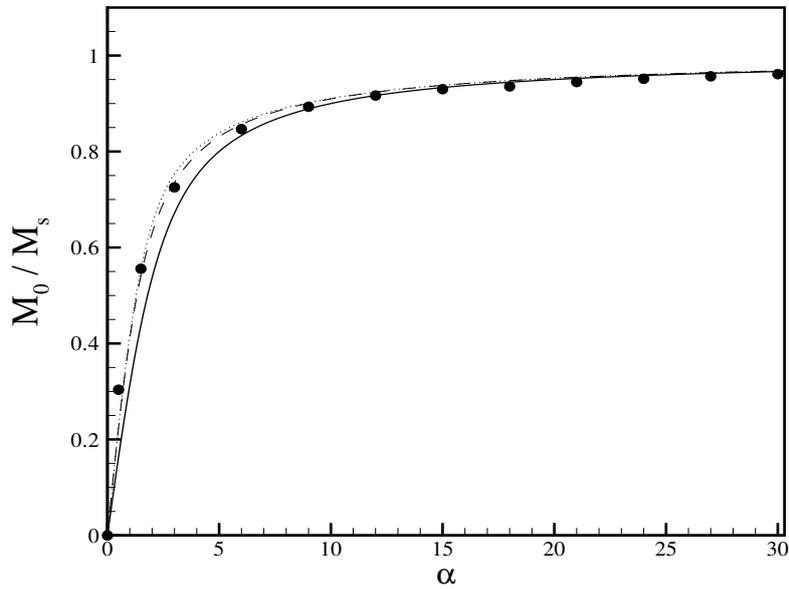


Figura 5.2: Magnetização de equilíbrio em função de α para $\phi = 15\%$ e $\lambda = 1$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.

A figura (5.3) mostra o comportamento observado para a magnetização da suspensão em função da fração volumétrica de partículas denotada por ϕ , para uma suspensão coloidal com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Nota-se uma boa concordância entre os valores numéricos obtidos com o método Dinâmica de Langevin com Somas de Ewald, (SE), o modelo de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$ e os modelos de ordem $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001). Para

valores de ϕ da ordem de 5%, observa uma pequena diferença nas soluções assintóticas $\mathcal{O}(\phi)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$, e para valores maiores de ϕ , essa diferença tende a aumentar. Para sistemas mais densos, nos quais as interações dipolares se tornam muito importante para a dinâmica microestrutural, a probabilidade de encontrarmos 4 ou mais partículas em torno de uma partícula teste qualquer aumenta. Dessa forma, se justifica a diferença, entre os valores numéricos para valores maiores de ϕ em comparação com o modelo de Langevin que não possui interações entre partículas e os modelos de Ivanov-Kuznetsova (2001), no quais interações entre pares e trios de partículas dominam.

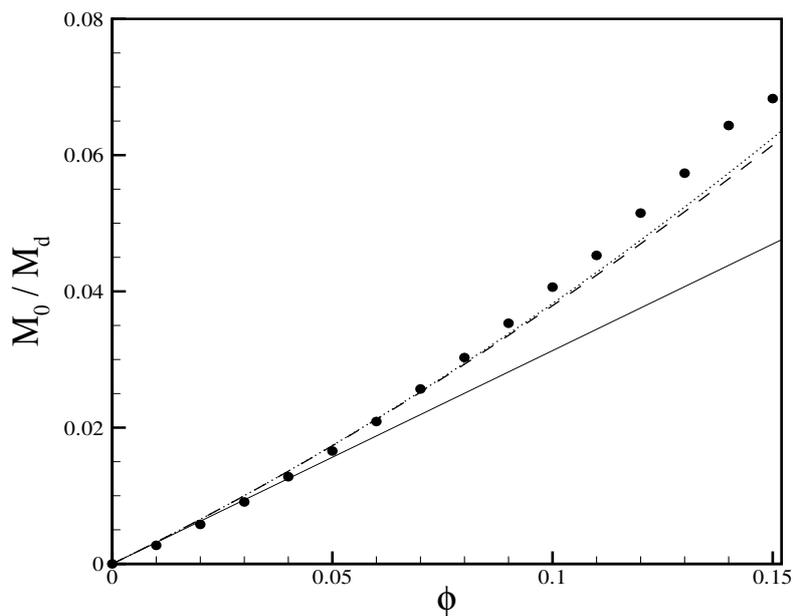


Figura 5.3: Magnetização de equilíbrio em função de ϕ com $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.

O gráfico da figura (5.4) mostra o comportamento para a magnetização da suspensão em função de λ , com $\alpha = 1$ e $\phi = 15\%$. Nota-se que os valores numéricos se aproximam razoavelmente dos modelos de Ivanov-Kuznetsova (2001).

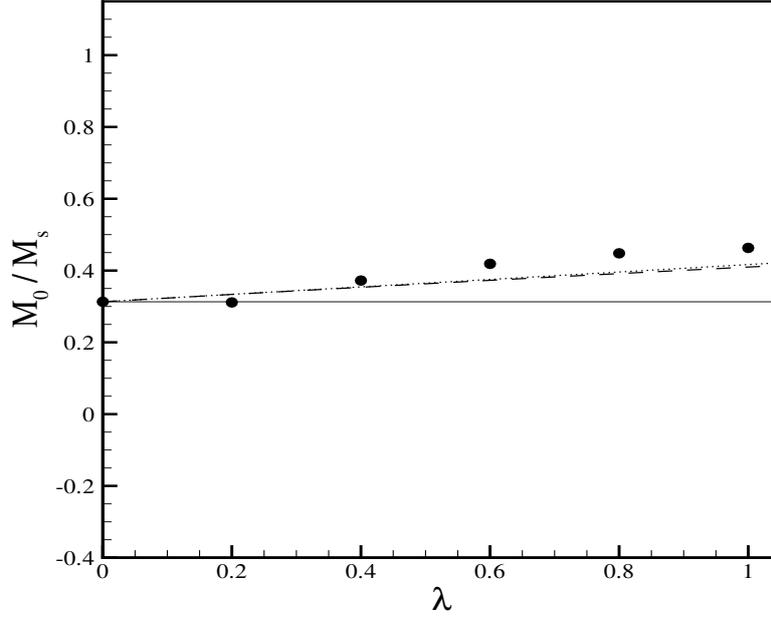


Figura 5.4: Magnetização de equilíbrio em função de λ com $\alpha = 1$ e $\phi = 15\%$. A linha contínua denota o modelo de Langevin, a linha pontilhada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e a linha tracejada representa o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos.

5.2 O comportamento da Susceptibilidade Complexa do Fluido Magnético com Interações Dipolares: Resultados e Validação do Código

Novamente foi aplicado um teste de convergência com o tamanho do sistema, para realização das simulações. Assim, para verificar como o número de partículas influencia os valores da parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético, foi gerada basicamente uma curva destes valores em função do número N de partículas conforme a figura (5.5). Foram realizadas diversas simulações para diferentes números de partículas, mantendo uma fração volumétrica igual a 10% com $\alpha = \lambda = Pe = 1$ e $\omega = 4$, e simulações com até 500 partículas e 50 realizações para cada simulação, considerando interações dipolares e hidrodinâmicas. Observa-se que os valores da susceptibilidade complexa saturam e assumem um valor aproximadamente constante para valores de $N \geq 300$. Dessa forma,

$N = 300$ apresenta um erro percentual de aproximadamente 1,0% para a parte real e 0,2% para a parte imaginária com relação a $N = 500$, e com um tempo de simulação de 72,03 hs com 300 partículas e 163,47 hs para 500 partículas. Nestas condições todas as simulações, com ou sem interações hidrodinâmicas-(IH), foram realizadas para um número de partículas de $N = 300$ e 50 realizações para cada simulação. Os valores numéricos foram obtidos utilizando o método Dinâmica de Langevin com Somas de Ewald denotado simplesmente por (SE) e Dinâmica de Langevin com Mínima Imagem denotado por (MI) e comparados com o modelo analítico apresentado por Berkov et al. (2009). Destaca-se também que em todos os casos nos quais consideraram as somas de Ewald foram usadas 125 células na *Lattice*.

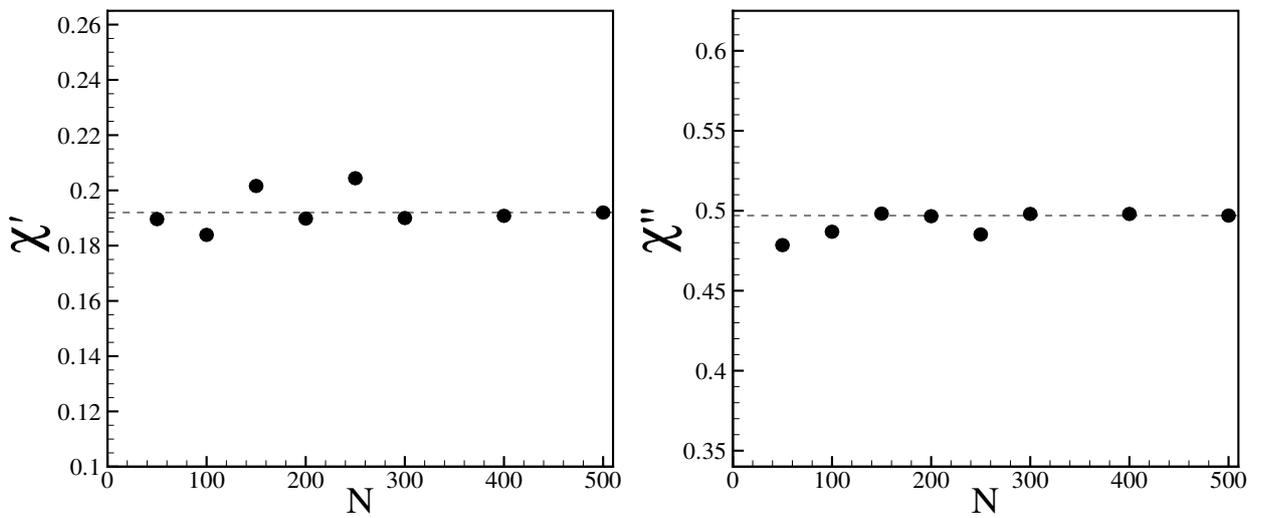


Figura 5.5: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função do número de partícula N para $\phi = 0.10$, $\alpha = \lambda = Pe = 1$ e $\omega = 4$ com interações dipolares e hidrodinâmicas.

A figura (5.6) mostra o comportamento da magnetização de equilíbrio oscilante em função do tempo para cinco ciclos, no qual foi considerado em (a) – $\omega = 0.5$, (b) – $\omega = 1.0$, (c) – $\omega = 2.5$ e (d) – $\omega = 4.0$, e todos os gráficos com uma fração volumétrica de partículas de $\phi = 0.10$ para $\alpha = \lambda = 1$. Observa-se uma diminuição na amplitude, isto é, na magnetização, com o aumento da frequência angular ω . Em baixa frequência, o campo magnético tem um tempo característico maior do que o tempo efetivo das partículas, e portanto, a magnetização é capaz de seguir o comportamento oscilante em fase com o campo magnético. À medida que a frequência aumenta, o tempo característico do campo

magnético reduz com relação ao tempo de relaxação magnética das partículas. Assim, a magnetização não está mais em fase com o comportamento oscilante do campo magnético, resultando em uma diminuição da magnetização com o aumento da frequência angular ω .

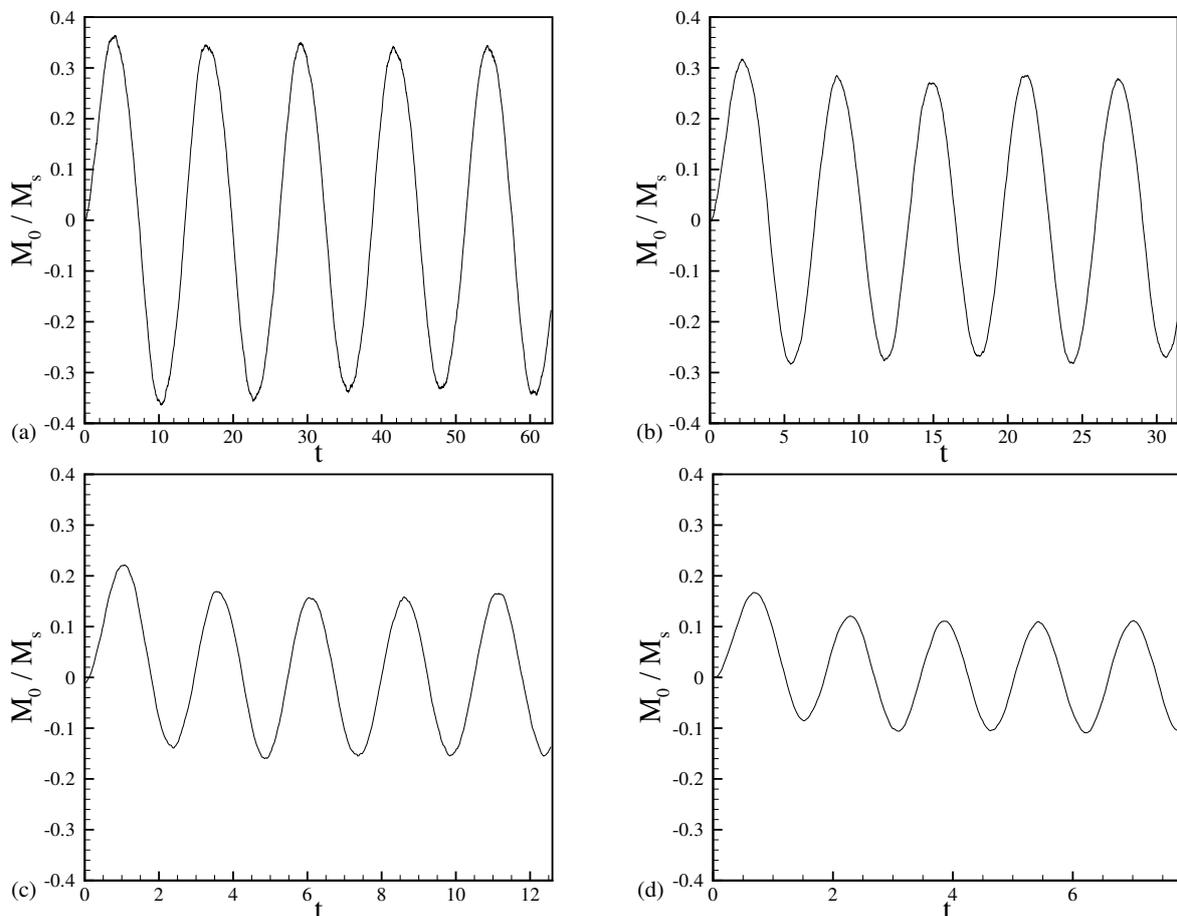


Figura 5.6: Resultado numérico da magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na figura (a), foi considerado a frequência angular para $\omega = 0.5$, em (b), $\omega = 1.0$, em (c), $\omega = 2.5$ e (d), $\omega = 4.0$.

As figuras (5.7), (5.8) e (5.9) mostram o comportamento da magnetização oscilatória em função do tempo adimensional, t com $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas em todos os gráficos representam os resultados analíticos dados na equação (4.6) e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE. Nota-se uma boa concordância em todos os gráficos entre os resultados numéricos e analíticos. Na figura (5.7) foi também considerado nas simulações $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$. Observa-se em (a) com $\omega = 1$, uma

maior amplitude da magnetização que em (b) com $\omega = 4$. Esse comportamento foi discutido anteriormente na figura (5.6). A mesma análise também é feita para a figura (5.8). Agora, para a figura (5.9) com $\alpha = 5$ em (a) e $\alpha = 10$ em (b), nota-se um comportamento não linear da magnetização. Observa-se na figura que a magnetização oscilatória tende a uma curva não senoidal. Verifica-se também um crescimento da magnetização com o aumento de α . De fato, o parâmetro α está relacionado com a amplitude do campo magnético oscilatório. Portanto, a intensificação do campo magnético aplicado com a elevação de α , acarreta um domínio do movimento da partícula por meio do campo aplicado e conseqüentemente redução dos efeitos brownianos.

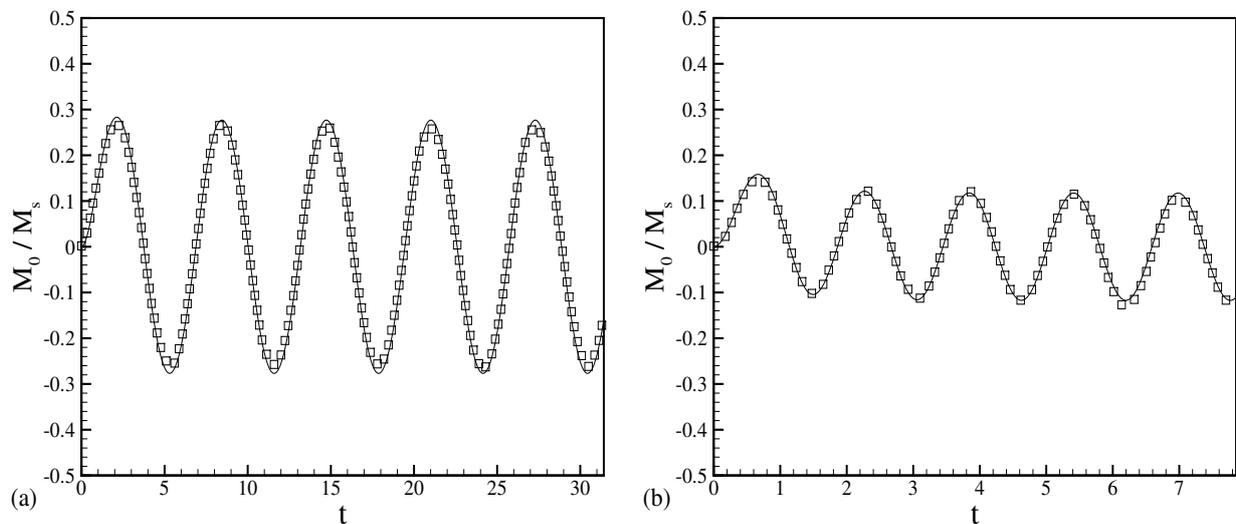


Figura 5.7: Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\omega = 1$ e fig. (b) considerou-se $\omega = 4$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.

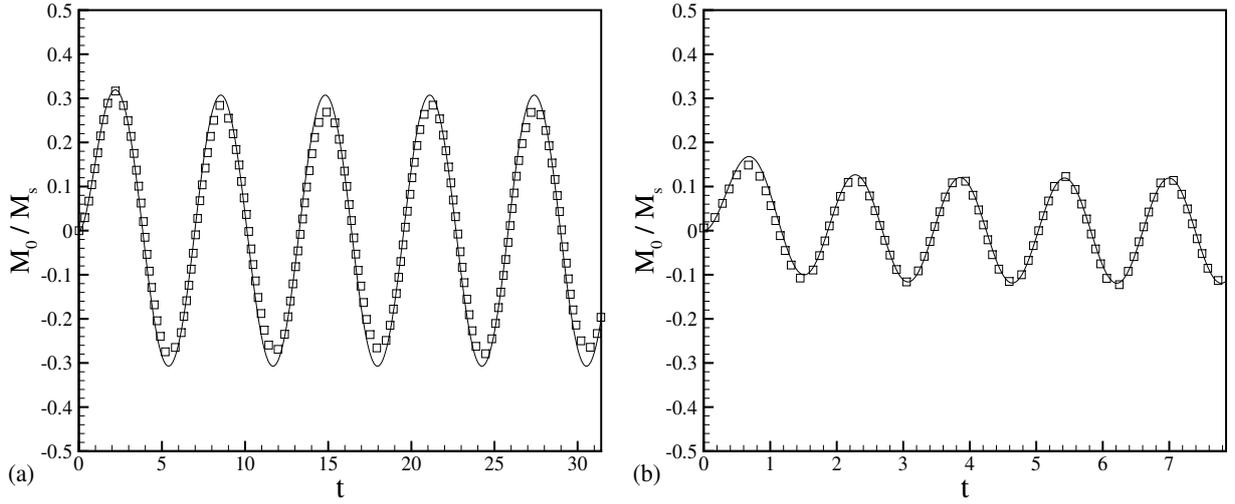


Figura 5.8: Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.1$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\omega = 1$ e fig. (b) considerou-se $\omega = 4$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.

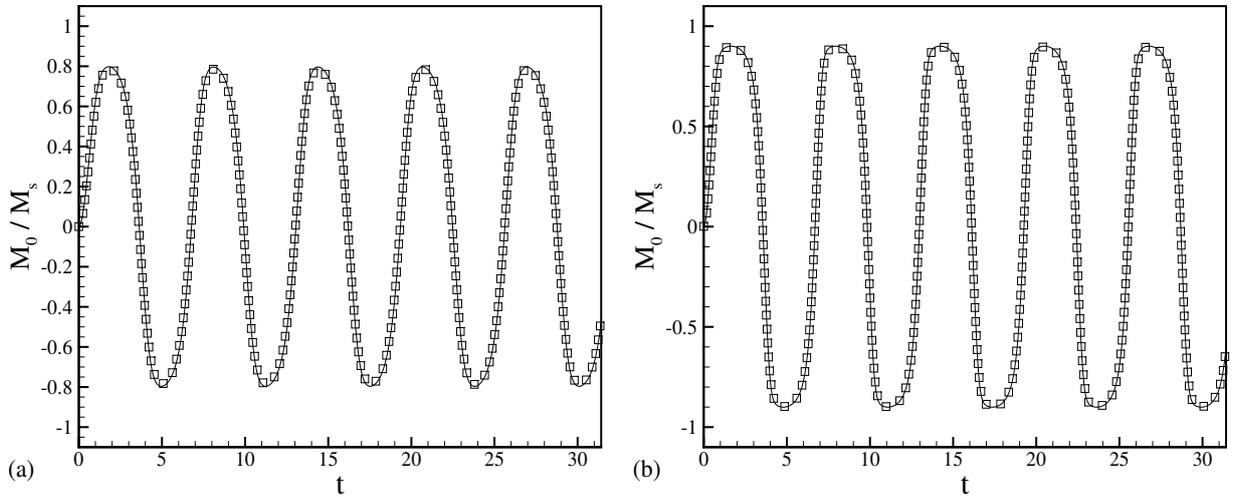


Figura 5.9: Magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo, com $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Na fig. (a) considerou-se $\alpha = 5$ e fig. (b) considerou-se $\alpha = 10$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os quadrados abertos representam os resultados numéricos obtidos com o método SE.

A figura (5.10), apresenta o comportamento da susceptibilidade complexa, destacando-se sua parte real e imaginária em função de ω , comparando os resultados numéricos dos métodos apresentados neste trabalho com o modelo analítico de Berkov et al. (2009). Observa-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos. Foi considerada nesta simulação uma suspensão diluída com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Nota-se que tanto para a parte real, quanto a parte imaginária, os resultados numéricos utilizando o método SE com círculos preenchidos e MI, com círculos vazios, estão bem próximos. Isso se deve ao fato que, para sistemas diluídos as interações dipolares podem ser desprezadas, considerando uma suspensão magnética de partículas nanométricas isoladas. Dessa forma,

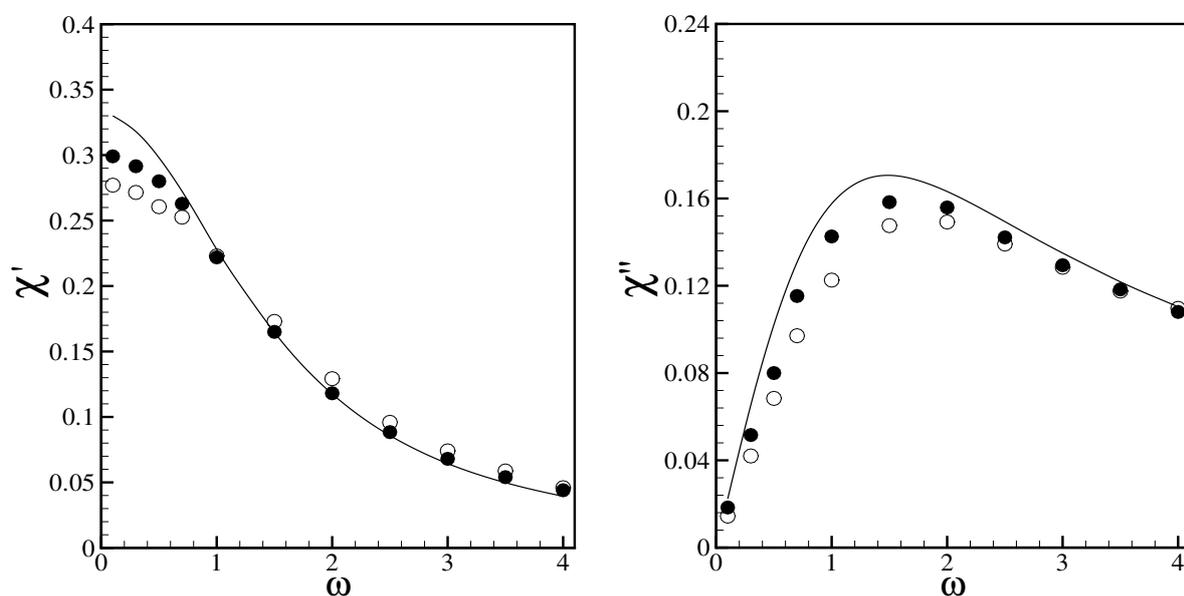


Figura 5.10: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI.

as forças de campo-partículas são dominantes com relação as forças de interação partícula-partícula. Portanto, o método de Dinâmica de Langevin com Mínima Imagem - MI, produz resultados numéricos com uma boa precisão para fluido magnético diluídos (Rosa et al.

2017). Também percebe-se uma boa aproximação com os resultados obtidos com o método Dinâmica de Langevin com Somas de Ewald - SE. O método SE é muito eficiente para cômputo de interações de longo alcance, mas com um custo computacional bem maior. A parte real da susceptibilidade complexa está relacionada com o armazenamento de energia magnética. Observa-se que para menores ω os valores de χ' são maiores e vão decrescendo com o aumento de ω . Como explicado anteriormente, existe uma diferença de fase entre a magnetização e o campo magnético oscilatório aplicado. Em baixa frequência as partículas conseguem uma "melhor" orientação na direção do campo oscilatório, devido ao tempo característico do campo aplicado ser maior que o tempo efetivo das partículas. À medida que se aumenta o valor de ω , o tempo característico do campo aplicado passa a ser menor. Dessa forma, as partículas passam a perceber esse campo externo com atraso, e assim, a magnetização, que é uma média dos momentos de dipolos na direção do campo, passa a ser bem menor no tempo para ω maiores, e conseqüentemente, há uma redução de sua energia magnética armazenada. Portanto, a magnitude da parte imaginária, que está relacionada com a dissipação de energia, aumenta em toda a região de frequência simulada, mas esse aumento é muito maior para frequências mais baixas do campo oscilatório e decresce para ω grande. Tanto os valores numéricos apresentados pelos dois métodos numéricos, quanto os resultados obtidos pelo modelo analítico, seguem os mesmos comportamentos apresentados em sua parte real e imaginária da susceptibilidade complexa.

As figuras (5.11) e (5.12) mostram o comportamento da susceptibilidade complexa, em termos de sua parte real e imaginária em função de ω , respectivamente para $\phi = 0.06$ e $\phi = 0.10$, ambas com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas, apresentando-se uma boa concordância com o modelo analítico de Berkov et al. (2009). Percebe-se, que o aumento da fração volumétrica de partículas, ϕ , provoca um crescimento no armazenamento de energia magnética, como mostra as figuras citadas. Além disso, esse aumento de ϕ , elevam os valores de suas partes imaginárias deslocando suavemente o "pico" de $\chi''(\omega)$ para frequências mais baixas, indicando uma mudança no tempo de relaxação magnética da partícula devido o aumento das interações dipolares. Assim, para suspensões magnéticas mais densas, a diferença cresce, entre os métodos SE com círculos preenchidos e MI com círculos vazios. Isso mostra que as interações dipolares de longo alcance entre as partículas, não são bem representadas pelo método de MI em sistemas mais densos, acarretando para

$\phi = 0.06$ e $\phi = 0.10$ aproximadamente os mesmos resultados apresentados em $\phi = 0.02$ com MI. Agora, tanto o método numérico SE, quanto o modelo analítico, computaram essa elevação na magnetização, como mostra a parte real da susceptibilidade complexa. De fato, além do aumento da fração volumétrica de partículas, há uma intensificação das interações dipolares entre as partículas, que ocasiona uma elevação no armazenamento de energia magnética, induzida por uma maior formação de cadeias e agregados na direção do campo magnético aplicado.

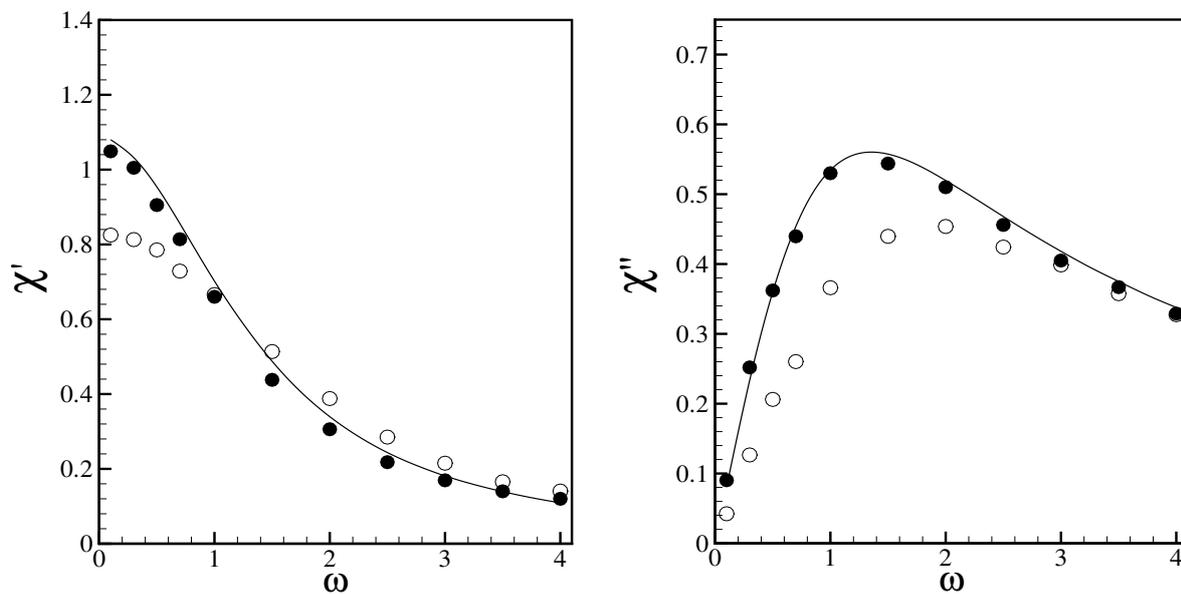


Figura 5.11: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.06$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI.

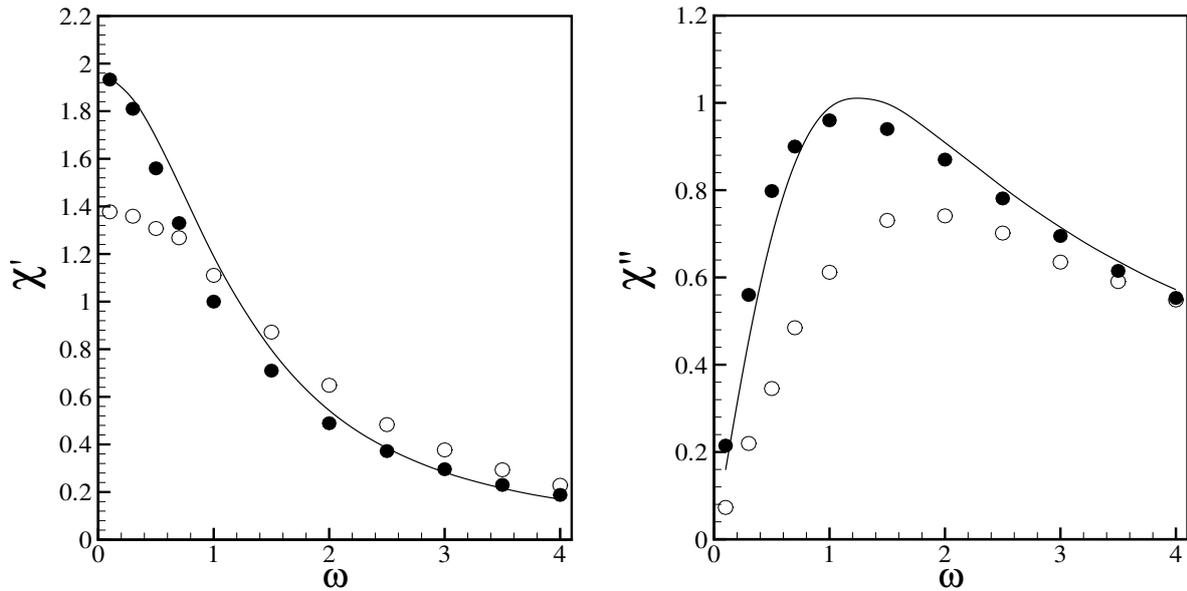


Figura 5.12: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE e os círculos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI.

A figura (5.13), mostra a comparação entre $\phi = 0.02$ e $\phi = 0.10$, da parte real e imaginária da susceptibilidade complexa, considerando $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Nota-se o aumento nos valores da parte real e imaginária com o crescimento da fração volumétrica de partículas. Observa-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e o analítico de Berkov et al. (2009), principalmente com o método SE, apresentados com círculos e triângulos preenchidos. Com relação ao resultado numérico utilizando MI apresentados com círculos e triângulos vazios, mesmo com a elevação de ϕ , o método não foi capaz de computar as interações dipolares entre as partículas, não apresentando um aumento efetivo na magnetização para frequências angulares relativamente pequenas. Já para ω grande, todos os resultados para $\phi = 0.10$ se aproximam, e as interações dipolares podem ser desprezadas. Assim, o método MI produz bons resultados somente para as suspensões magnéticas diluídas. O crescimento nas formações de cadeias e agregados, devido a elevação das interações dipolares acarreta uma diminuição no tempo de relaxação magnética das

partículas, justificando a mudança do "pico" de $\chi''(\omega)$ para frequências mais baixas com o aumento da concentração de partículas magnéticas, como mostrado na figura (5.13).

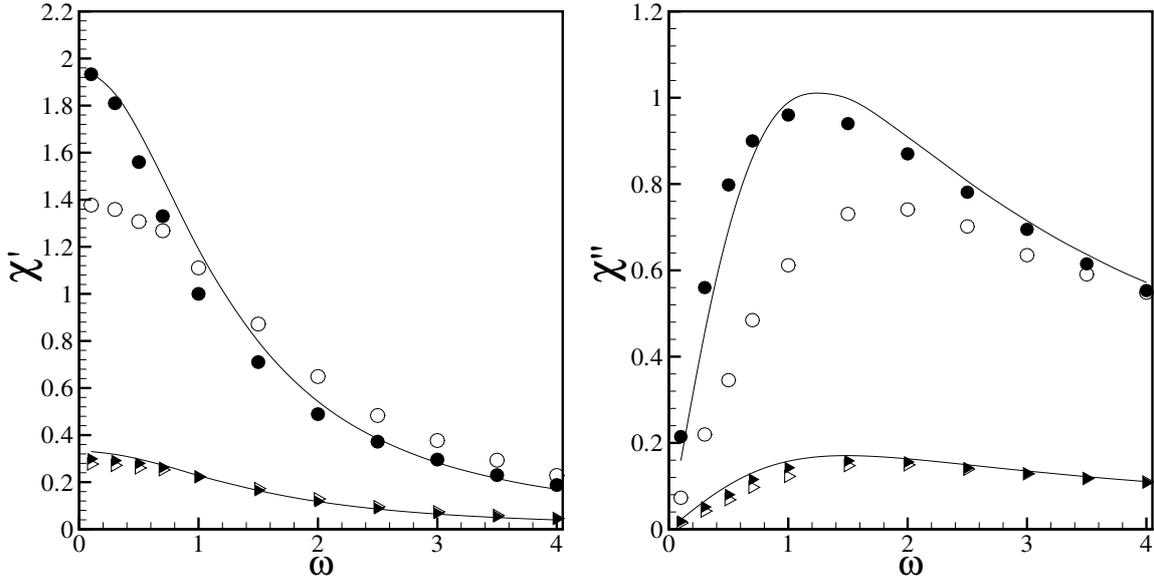


Figura 5.13: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. As linhas contínuas grossa e fina, representam o modelo de Berkov et al. (2009) respectivamente com, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$, os círculos e triângulos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ e os círculos e triângulos vazios representam os valores numéricos obtidos com o método MI para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$.

A figura (5.14) apresenta em escala logarítmica, para uma melhor visualização, a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função de ω para $\alpha = 1$ e $\alpha = 5$, sendo considerado em todos os resultados $\phi = 0.10$ e $\lambda = 1$. Os resultados numéricos obtidos por meio do método SE, com círculos preenchidos para $\alpha = 1$ e quadrados preenchidos para $\alpha = 5$, mostram uma boa concordância com o modelo analítico de Berkov, apresentado com a linha grossa para $\alpha = 5$ e linha fina para $\alpha = 1$. Como descrito anteriormente, o método MI com $\alpha = 1$ e $\phi = 0.10$ não apresenta uma boa eficácia para sistema mais denso, mas ao considerar $\alpha = 5$, a aproximação com o método SE foi satisfatório. Nestas condições, ao considerar $\alpha \gg 1$, as interações campo-partículas tornam-se dominante com relação as interações partícula-partícula e forças brownianas que passam a não influenciar no comportamento do sistema, e dessa forma, os resultados numéricos com os dois métodos

tendem a se aproximar. É possível notar um pequeno deslocamento do "pico" de $\chi''(\omega)$ para frequências mais altas com o aumento do parâmetro $\alpha = 1$ para $\alpha = 5$, indicando uma mudança no tempo efetivo de resposta das partículas em consequência da intensificação do campo aplicado. Dessa forma, à medida que o campo magnético oscilatório aumenta em decorrência da elevação de α , observa-se tempos de relaxação efetivos mais rápidos das partículas magnéticas.

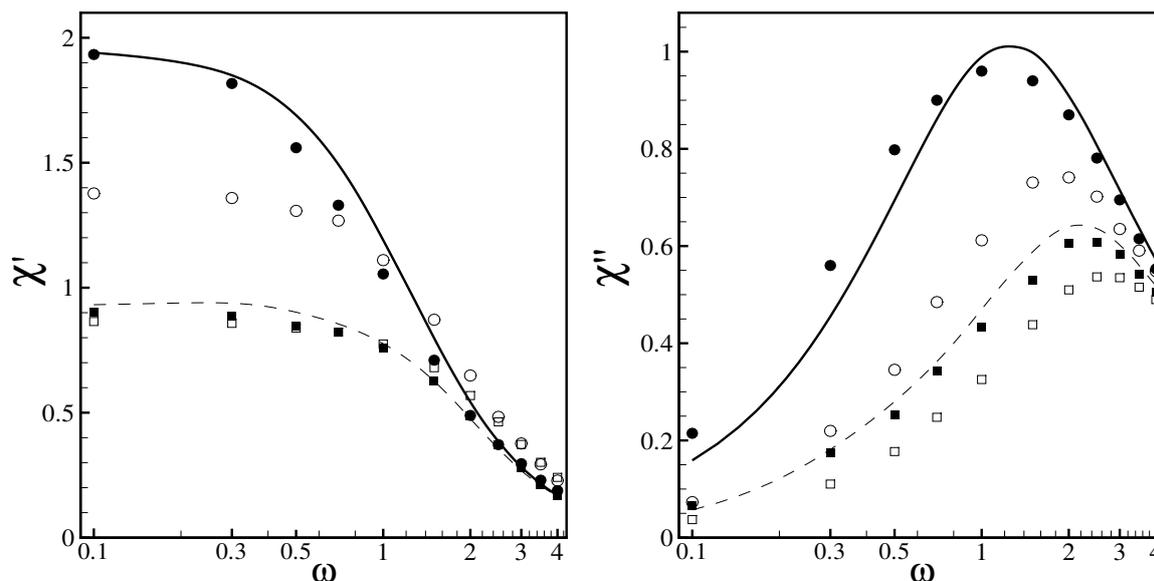


Figura 5.14: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. As linhas contínuas grossa e fina, representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1$ e $\alpha = 5$ respectivamente, os círculos e quadrados preenchidos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\alpha = 5$ e os círculos e quadrados vazios representam os valores obtidos com o método MI para $\alpha = 1$ e $\alpha = 5$.

O gráfico da figura (5.15) compara a parte imaginária normalizada, com três valores de α diferentes. Assim, foi considerado $\alpha = 1, 2$, e 3 com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ em todos os resultados. Observa-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos. Nestes gráficos, são apresentados somente os resultados com SE, com losangos, triângulos e quadrados abertos, respectivamente com $\alpha = 1, 3$, e 5 e o modelo analítico apresentado por Berkov, com linha contínua, traço-ponto e pontilhada respectivamente para $\alpha = 1, 3$ e 5 .

Como descrito anteriormente, conforme aumenta o valor de α , o "pico" de $\chi''(\omega)$ se desloca para valores maiores de ω , indicando uma mudança no tempo de relaxação magnética da partícula.

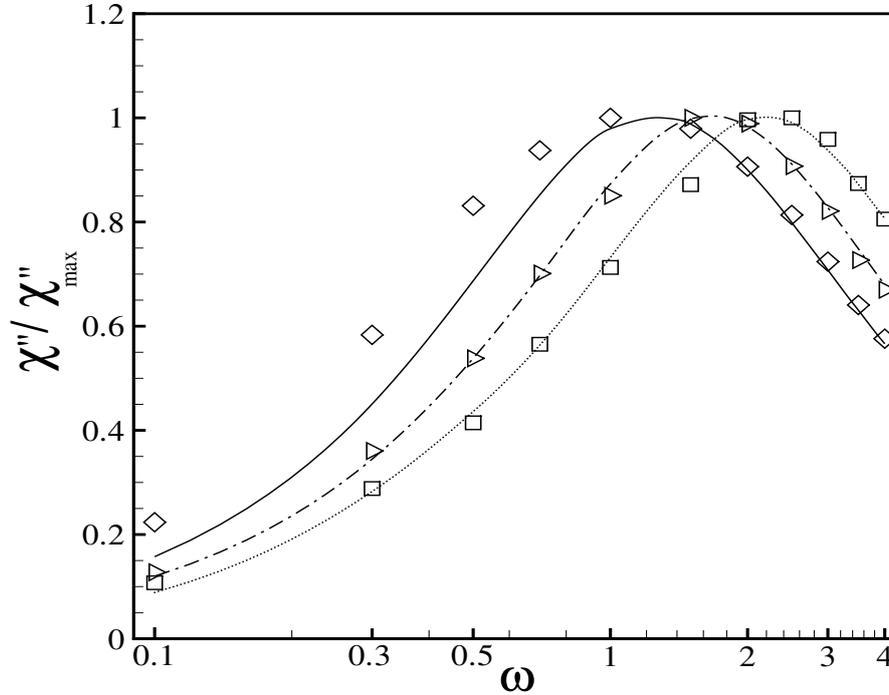


Figura 5.15: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem interações hidrodinâmicas. com linha contínua, traço-ponto e pontilhada representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1$, $\alpha = 3$ e $\alpha = 5$ respectivamente e os losangos, triângulos e quadrados abertos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1$, $\alpha = 3$ e $\alpha = 5$.

5.3 A influência das Interações Hidrodinâmicas no comportamento da Susceptibilidade Complexa

Nesta seção, foram consideradas nas simulações interações hidrodinâmicas e dipolares simultaneamente e os resultados comparados com os obtidos por meio de simulações com apenas interações dipolares. Todas as simulações foram realizadas para um número fixo de partículas de $N = 300$ e 50 realizações conforme o teste de convergência apresentado na

figura (5.5).

A figura (5.16) mostra uma suspensão de partículas magnéticas considerando em (a) somente interações dipolares e (b) com interações dipolares e hidrodinâmicas. Nota-se em (a) o efeito agregativo das interações dipolares atuando nas formações de cadeias e agregados, em contrapartida, em (b) o efeito dispersivo das interações hidrodinâmicas quebrando essas cadeias e agregados.

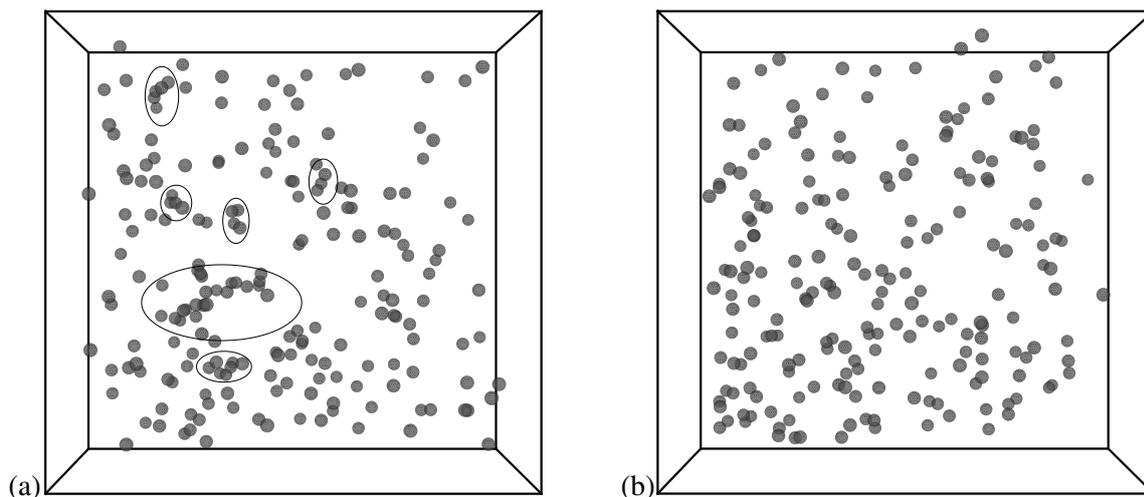


Figura 5.16: Suspensão de partículas magnéticas. Figura (a), com interações dipolares e figura (b), com interações dipolares e hidrodinâmicas, ambas considerando $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Resultados obtidos por meio de simulação computacional de muitos corpos.

A figura (5.17) mostra o comportamento da susceptibilidade complexa em função da frequência angular ω considerando $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Observa-se uma boa concordância entre os resultados do modelo analítico de Berkov et al. (2009) com linha contínua e os numéricos com SE apresentados com círculos preenchidos e losangos abertos, respectivamente sem interações hidrodinâmicas e com interações hidrodinâmicas. Os resultados numéricos apresentaram aproximadamente os mesmos valores. Essa característica é devido a baixa fração volumétrica de partículas. Assim, para sistemas diluídos as partículas são consideradas relativamente isoladas podendo desprezar as interações de longo alcance. Portanto, o comportamento da susceptibilidade complexa permaneceu o mesmo nos resul-

tados numéricos. Destaca-se que os mecanismos responsáveis pelo comportamento da parte real e imaginária para $\phi = 0.02$, foram descritos na seção anterior nos resultados (5.10).

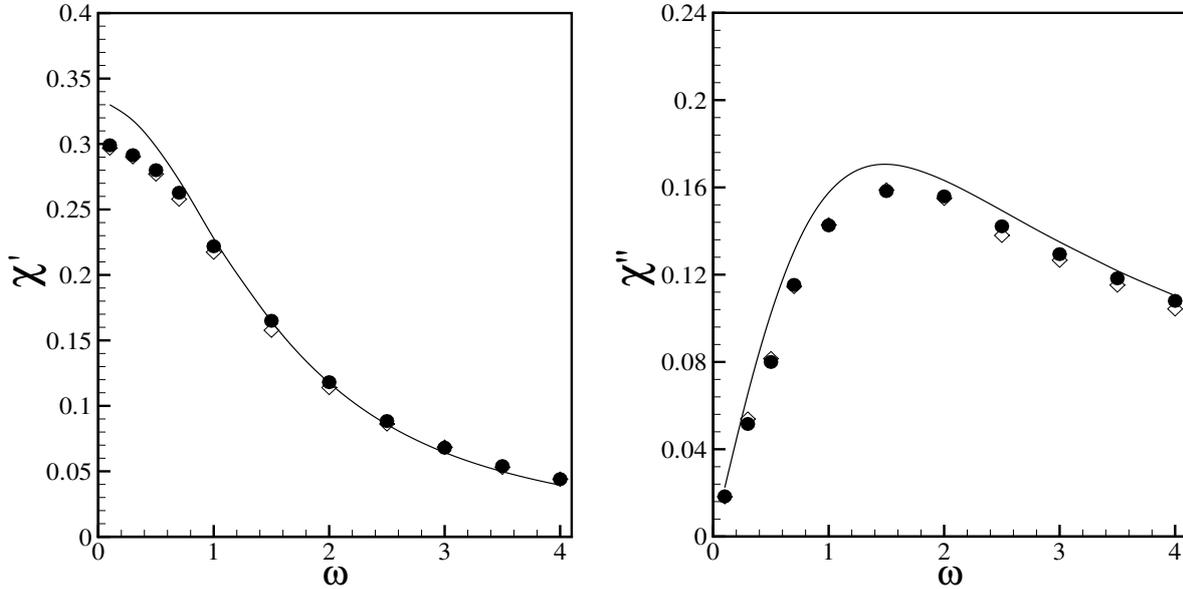


Figura 5.17: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.02$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.

As figuras (5.18) e (5.19) apresentam o comportamento da susceptibilidade complexa do fluido magnético considerando interações dipolares e sem IH com círculos preenchidos e interações dipolares e IH com losangos vazios em função de ω , respectivamente com $\phi = 0.06$ e $\phi = 0.10$ ambas com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Ressalta-se agora a comparação do comportamento da susceptibilidade complexa considerando interações dipolares entre partículas magnéticas e interações dipolares e hidrodinâmicas simultaneamente. O resultado numérico sem IH mostrou uma boa concordância com o resultado analítico de Berkov et al. (2009). Os resultados com SE, considerando interações hidrodinâmicas, apresentaram os valores um pouco abaixo dos resultados obtidos com somente interações dipolares, principalmente para ω menores. Essa diferença acentua-se com a elevação da fração volumétrica de partículas como é observado para $\phi = 0.10$. Esse comportamento nos resultados numéricos, se deve

principalmente porque interações dipolares possuem características agregativas, enquanto interações hidrodinâmicas apresentam uma característica dispersiva resultando em quebra de cadeias e agregados de partículas, levando a uma diminuição no armazenamento de energia representado por χ' e conseqüentemente uma redução na sua dissipação de energia térmica na forma de calor representada por χ'' . Essa diferença entre os resultados numéricos é percebida principalmente para valores maiores de ϕ .

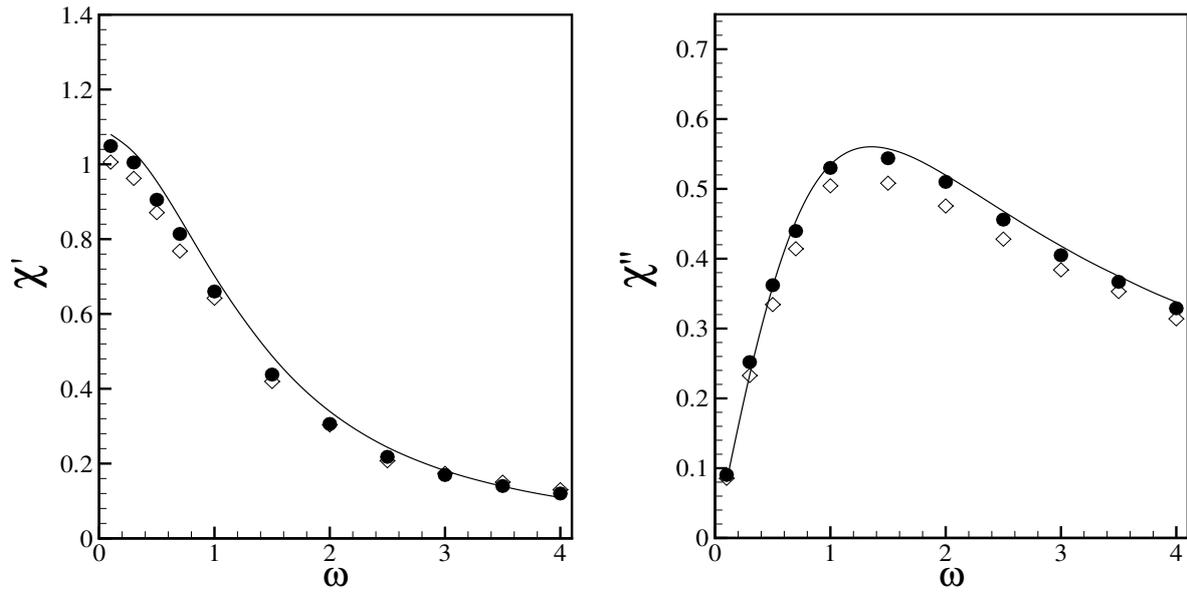


Figura 5.18: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.06$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.

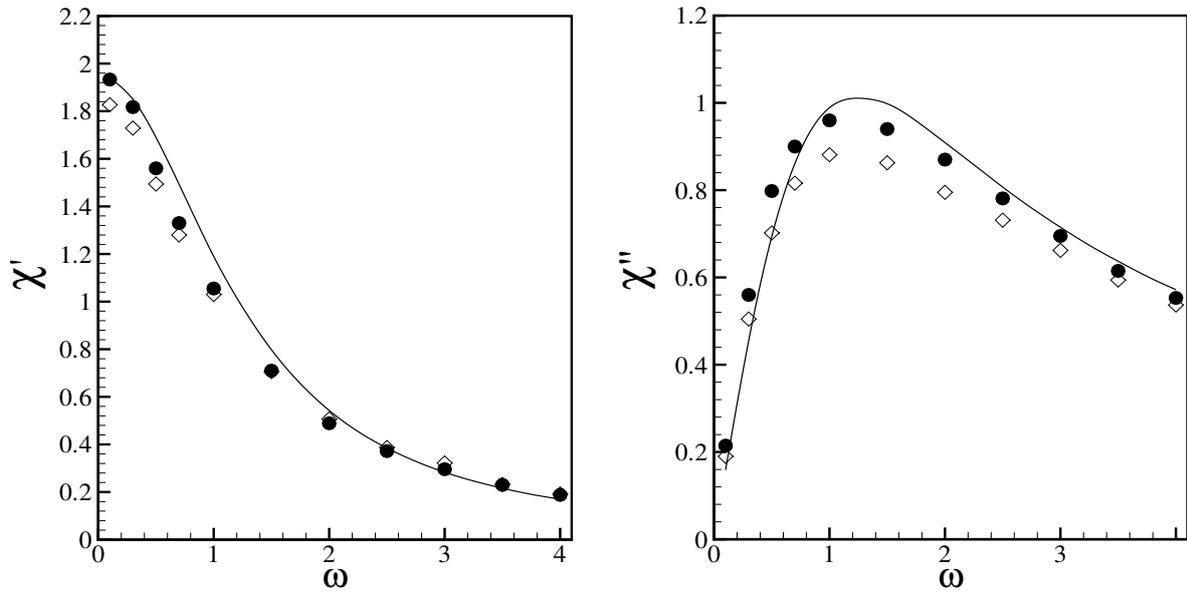


Figura 5.19: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético sob ação de um campo magnético oscilatório em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o modelo de Berkov et al. (2009), os losangos vazios e círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE, respectivamente com e sem interações hidrodinâmicas.

A figura (5.20) mostra a comparação da susceptibilidade complexa em função de ω , para $\phi = 0.10$, $\phi = 0.02$ e $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ em todos os resultados. As linhas contínuas, grossa e fina representam o modelo analítico de Berkov et al. (2009), os círculos e triângulos preenchidos representam os resultados numéricos com SE na presença de interações dipolares e os losangos e quadrados vazios são os valores numéricos utilizando o método SE com interações dipolares e hidrodinâmicas. Novamente nota-se a elevação tanto na parte real quanto na parte imaginária em consequência a um maior valor de ϕ . Os mecanismos responsáveis pelo comportamento da susceptibilidade complexa foram descritos nos resultados de (5.13), (5.17) e (5.19).

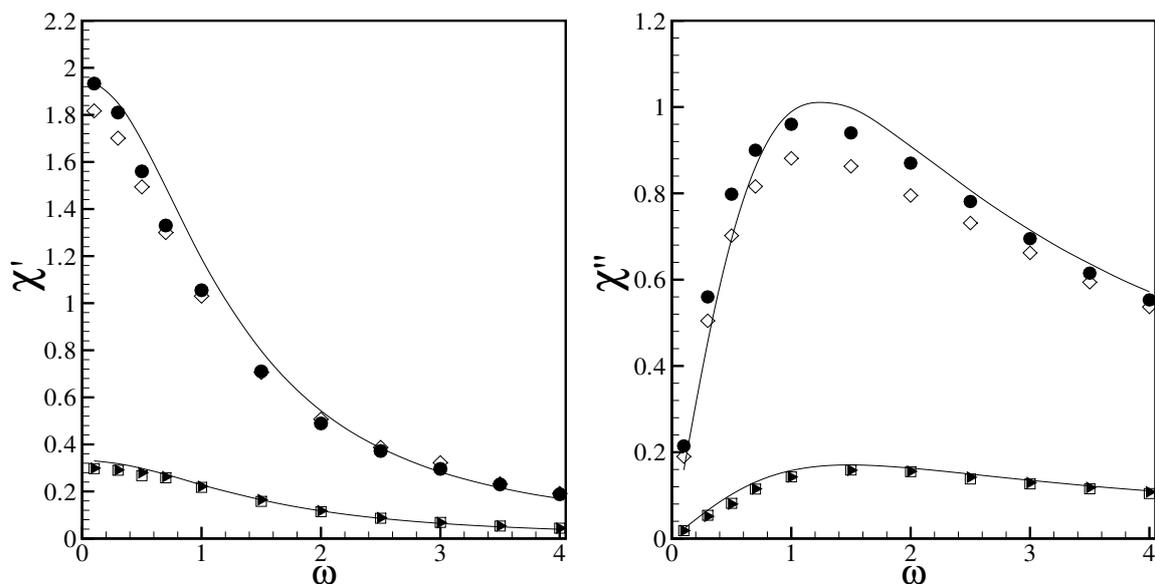


Figura 5.20: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas grossa e fina representam o modelo de Berkov et al. (2009) respectivamente com, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$, os círculos e triângulos preenchidos representam os valores numéricos obtidos com o método SE para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ sem interações hidrodinâmicas e os losangos e quadrados vazios representam os valores numéricos obtidos utilizando o mesmo método para, $\phi = 0.10$ e $\phi = 0.02$ com interações hidrodinâmicas.

A figura (5.21) apresenta a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa de um fluido magnético com interações dipolares e hidrodinâmicas em função de ω considerando $\alpha = 1, 3$, e 5 e todas as simulações com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Os comportamentos apresentados nos gráficos foram detalhados anteriormente na análise dos resultados de (5.14). Portanto, destaca-se nesta análise a comparação entre os resultados numéricos com interações dipolares e sem interações hidrodinâmicas apresentados por círculos, triângulos e quadrados preenchidos com os resultados numéricos com interações dipolares e hidrodinâmicas apresentados por losangos, triângulos e quadrados vazios. Nota-se que para α 's maiores os resultados numéricos com e sem interações hidrodinâmicas vão se aproximando. De fato, para valores de $\alpha > 1$ a força de campo aplicado passa a dominar os movimentos das partículas, inibindo os efeitos das interações dipolares e hidrodinâmicas.

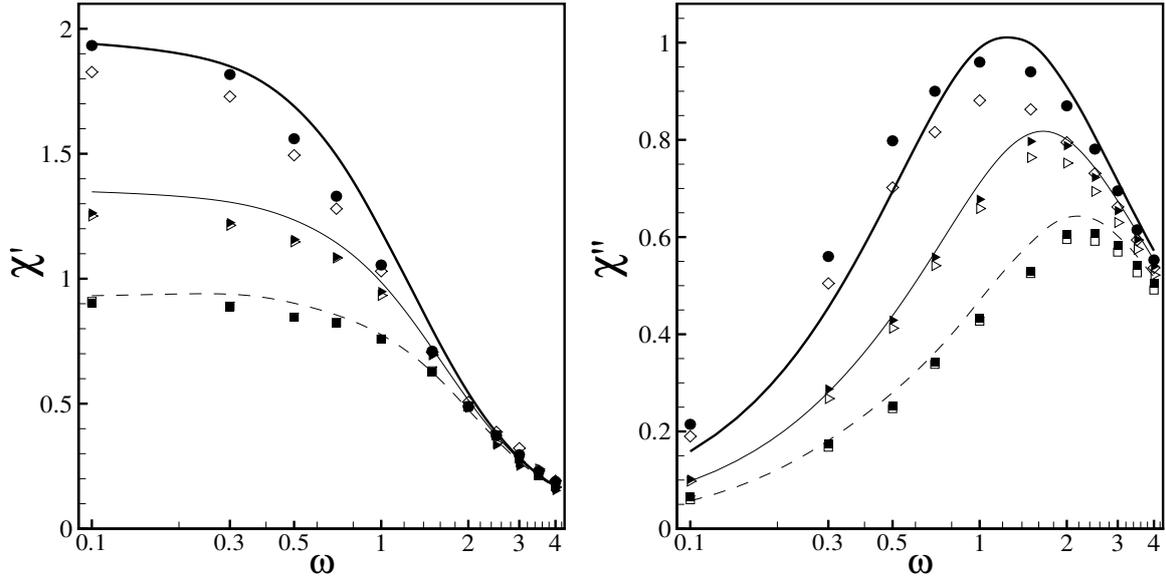


Figura 5.21: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, com $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas grossa, fina e tracejada, representam o modelo de Berkov et al. (2009) com $\alpha = 1, 3$ e 5 respectivamente, os círculos, triângulos e quadrados preenchidos representam os valores obtidos com o método SE para $\alpha = 1, 3$ e 5 sem interações hidrodinâmicas e os losangos, triângulos e quadrados vazios representam os valores numéricos obtidos utilizando o mesmo método para, $\alpha = 1, 3$ e 5 com interações hidrodinâmicas.

A figura (5.22) mostra o efeito das interações hidrodinâmicas na parte imaginária da susceptibilidade complexa, considerando $\phi = 0.1$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Observe que para todos os valores testados de ω a capacidade do fluido magnético em dissipar a energia do campo é menor quando considerada a influência das interações hidrodinâmicas. Esse comportamento está associado à natureza dispersiva das IH. No encarte superior da figura (5.22), observa-se que as interações dipolares tendem a induzir agregados e cadeias locais. Em contraste, a presença de IH é responsável por quebrar essas cadeias e agregados, e conseqüentemente resulta em uma magnetização mais baixa, como mostra o encarte inferior. Também é interessante notar que as diferenças na resposta do χ'' induzidas pelo mecanismo isolado de interações hidrodinâmicas de longo alcance parecem ser uma função de ω . Assim, defina $\Delta_{IH} = \chi''_{-IH} - \chi''_{IH}$, sendo χ''_{-IH} e χ''_{IH} como as partes imaginárias da susceptibilidade complexa sem e com IH, tem-se que $\Delta_{IH} = f(\omega)$. As simulações numéricas indicam que,

para ambos os limites assintóticos ($\omega \ll 1$ e $\omega \gg 1$) $\Delta_{IH} \rightarrow 0$, enquanto para uma faixa intermediária de $\omega \approx 1$, Δ_{IH} se aproxima de um máximo local. Esse comportamento indica que o mecanismo físico responsável pela sensibilidade da resposta do fluido magnético ao efeito das IH deve depender de um acoplamento entre diferentes escalas de tempo. Como ω é basicamente o inverso da escala de tempo característico do campo ($t_{campo} = \omega^{-1}$) as perturbações hidrodinâmicas viscosas produzidas por uma partícula e propagadas através do fluido por difusão de vorticidade, exige um forte acoplamento entre uma escala de tempo hidrodinâmica t_h e magnéticas. Dessa forma, t_h é a escala de tempo típica de difusão de momento pela ação da viscosidade cinemática do líquido transportador ν . Portanto, pode-se definir t_h por $t_h = a^2/\nu$. Ao comparar essas duas escalas de tempo, leva a um parâmetro físico $t_h/t_{campo} = \omega a^2/\nu$ que poderia ser usado como uma medida do grau de acoplamento entre a ação do campo magnético oscilatório externo e a sensibilidade das partículas ao efeito de IH.

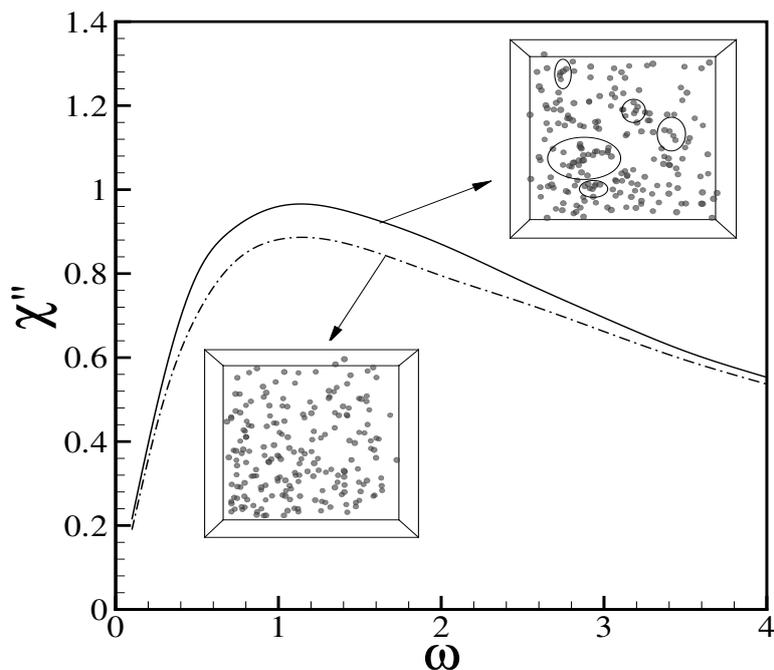


Figura 5.22: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω . A linha contínua representa o resultado numérico com o método (DL)-Somas de Ewald sem interações hidrodinâmicas e a linha traço-ponto representa o resultado numérico com o método (DL)-Somas de Ewald com interações hidrodinâmicas. Os parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$.

5.4 Resultados de Simulações com Interações Hidrodinâmicas e Dipolares para diferentes números de Péclet

O efeito de Pe na parte real e imaginária da susceptibilidade complexa de um fluido magnético, submetido a um campo magnético oscilatório é mostrado na figura (5.23). As simulações foram realizadas com e sem IH para efeito de comparação. Também considerou-se a fração volumétrica de partículas, $\phi = 0.1$ com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. No encarte apresentado na parte imaginária, o resultado numérico calculado com SE sem IH é comparado com a teoria assintótica de Berkov et al. (2009). Ainda analisando o resultado do encarte, observa-se que para $Pe \leq 1$ uma boa concordância entre o resultado numérico e o resultado assintótico. Agora, para $Pe > 1$ os resultados apresentam um desvio, devido ao fato, que o resultado assintótico ser limitado aos regimes brownianos. Dessa forma, para valores com $Pe > 1$, os resultados numéricos foram apresentados sem a comparação com a teoria assintótica. Com relação a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa, a diferença entre os resultados com IH e sem IH é notável para valores menores de Pe . Para maiores valores de Péclet, o efeito browniano é reduzido e as forças magnéticas passam a dominar as IH, não mostrando diferença nos resultados. Nota-se que para cada ω apresentado χ'' atinge um valor máximo para um determinado Pe . Assim, a variação de Pe provoca uma mudança no tempo de relaxação magnética das partículas influenciando a dissipação térmica. Através das simulações numéricas, pode-se medir a influência da hidrodinâmica ativando e desativando as IH de longo alcance e também alterando o valor do número de Péclet. Outra característica interessante aqui, é a maneira de como a hidrodinâmica influencia o movimento rotacional das partículas, podendo ser sentida por dois mecanismos diferentes. Enquanto o primeiro mecanismo está relacionado às interações partícula-partícula, o segundo está associado à interações direta fluido-partícula. Note que, o comportamento apresentado na figura (5.23), fica claro que o número de Péclet tem uma grande influência no movimento rotacional das partículas. Um aumento em Pe representa uma escala de tempo Browniana mais alta, assim, as partículas se comportam menos sensíveis ao movimento browniano e mais sensíveis ao arrasto viscoso. Portanto, essa menor sensibilidade a efeitos flutuantes decorrentes do movimento browniano também permite

que as partículas percebam de maneira mais proeminente forças e torques magnéticos. A dominância de efeitos magnéticos para números mais elevados de Pe também dificulta a percepção de IH. Dessa forma, as maiores diferenças na parte imaginária da susceptibilidade complexa, devido às IH, são observáveis apenas para valores menores de Pe .

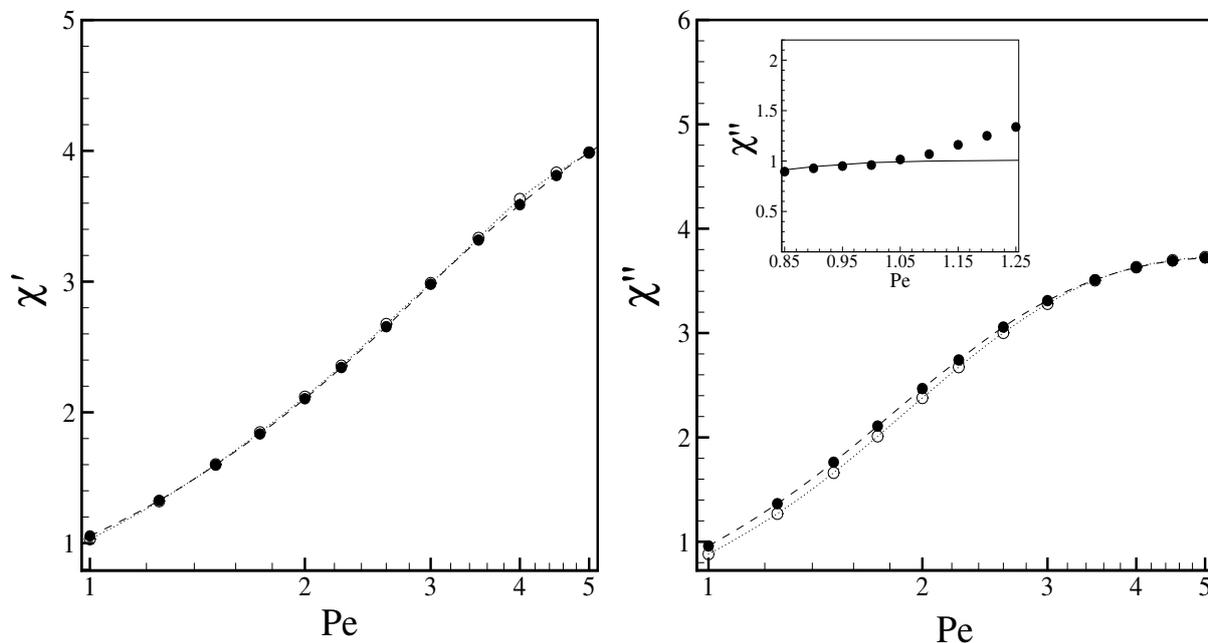


Figura 5.23: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função de Pe . Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE na ausência de IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE com IH ambas com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ $\phi = 0.10$ e $\omega = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.

A figura (5.24) mostra a magnetização em função do tempo para $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$ sem IH considerando quatro valores de número de Péclet. Observa-se nos resultados do gráfico que o aumento do número de Péclet acarreta um crescimento da magnetização. O número de Péclet é definido como a razão entre um tempo característico de difusão browniana e um tempo característico de sedimentação. Assim, para $Pe > 1$ os efeitos brownianos são reduzidos e o campo magnético aplicado passa a dominar o movimento das partículas aumentando a sua magnetização com o crescimento de Pe como é mostrado em todos os gráficos da figura (5.24).

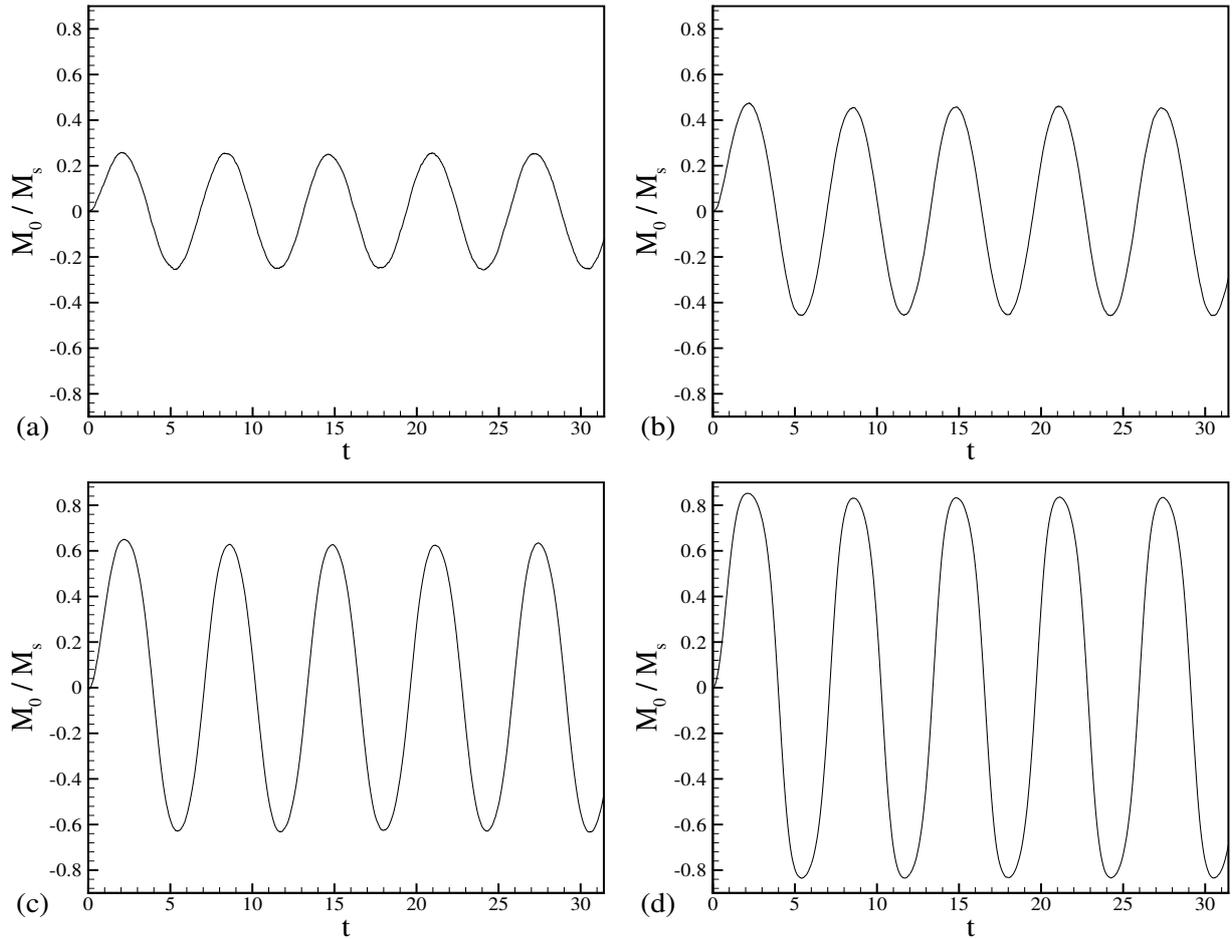


Figura 5.24: Resultados numéricos da magnetização de equilíbrio da suspensão sob ação de um campo magnético oscilatório em função do tempo obtidos com SE, com $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Na figura (a), foi considerado nas simulações $Pe = 1$, (b) com $Pe = 1.5$, (c) com $Pe = 2$ e (d) com $Pe = 3$.

A figura (5.25) mostra a parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de Péclet. Foram realizadas comparações entre os resultados numéricos considerando IH e sem IH. Nas simulações considerou-se os parâmetros $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $\phi = 0.1$. A diferença entre os resultados com IH e sem IH é notável principalmente para valores menores de Pe . Para maiores valores de Péclet, as forças magnéticas dominam as IH, não mostrando diferença nos resultados. Nota-se que para cada ω apresentado χ'' atinge um valor máximo para um certo número de Péclet. A parte imaginária da susceptibilidade complexa χ'' está associada à dissipação de energia magnética na forma de calor. Portanto, a variação do número de

Péclet devido a uma mudança no tempo de relaxação das partículas, deve influenciar a dissipação de calor.

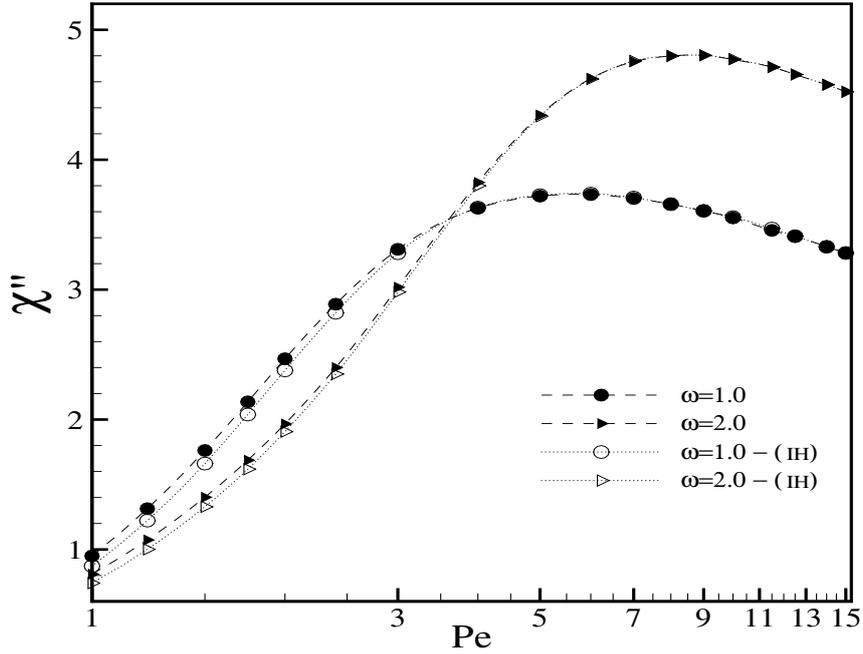


Figura 5.25: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de Pe para $\omega = 1$ e $\omega = 2$. Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.

A figura (5.26) e (5.27) apresenta a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético para vários números de Péclet com $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $\phi = 0.1$. À medida que o valor de Pe aumenta, a parte real da susceptibilidade complexa também cresce. Quando aumenta o número de Péclet, a uma redução dos efeitos brownianos acarretando um aumento sistemático na parte real e imaginária da susceptibilidade complexa. Nota-se aqui o mesmo padrão de como as partículas são mais sensíveis às interações hidrodinâmicas em regimes mais baixos. Como mencionado anteriormente, para um Pe maior as forças magnéticas dominam os efeitos das interações hidrodinâmicas. Observe também uma mudança do pico de χ'' para a direita com o aumento do número de Péclet, indicando uma mudança no tempo de relaxação magnética das partículas. Um efeito semelhante foi observado por

Berkov et al. (2009), mas por um mecanismo físico diferente. No trabalho mencionado, os autores observaram uma mudança no pico de χ'' para frequências mais baixas devido a um aumento de ϕ na ausência de IH. Eles relacionaram esse efeito como consequência das crescentes interações dipolares que alteram o tempo de relaxamento das partículas. Outro comportamento interessante mostrado nos resultados é que para valores grandes de ω , a parte real, χ' , tende para zero, o que seria um limite de um campo fixo que não produz qualquer efeito sobre a susceptibilidade complexa de um fluido magnético. Isso se deve ao fato de que a magnetização não é capaz de seguir o comportamento oscilatório em fase com o campo magnético aplicado. Assim, para frequências angulares mais altas, o campo magnético tem um tempo característico muito menor que o tempo efetivo de resposta das partículas, resultando em uma magnetização menor. Porém, para ω bem pequenos o resultado é um armazenamento de energia maior e uma dissipação menor, como mostra as figuras.

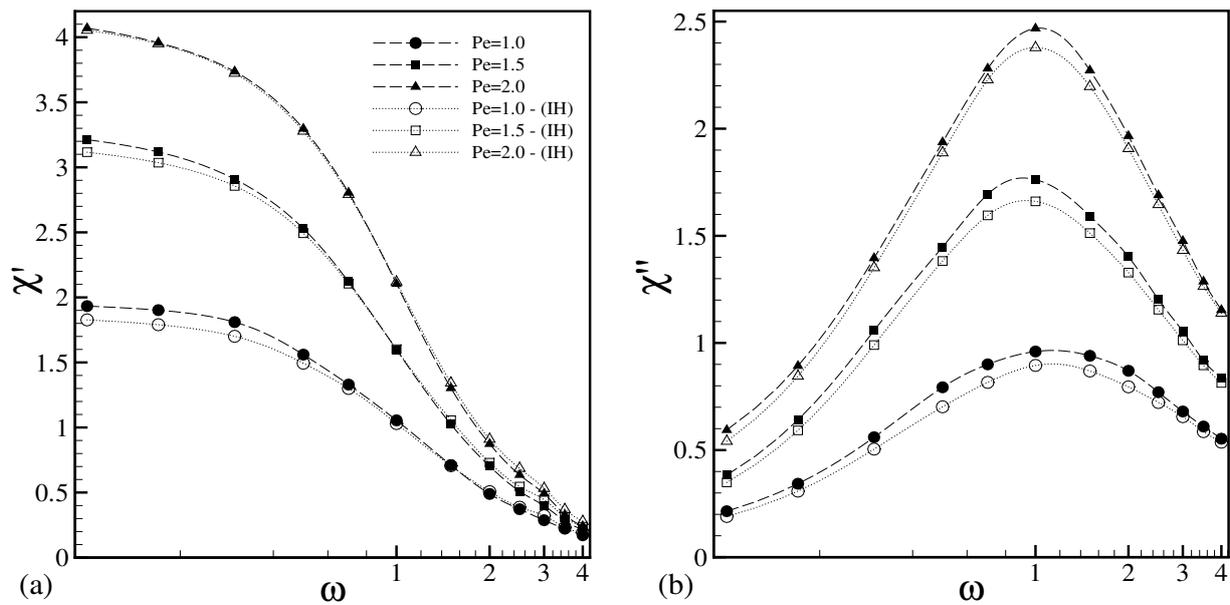


Figura 5.26: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω , para vários Pe . Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.

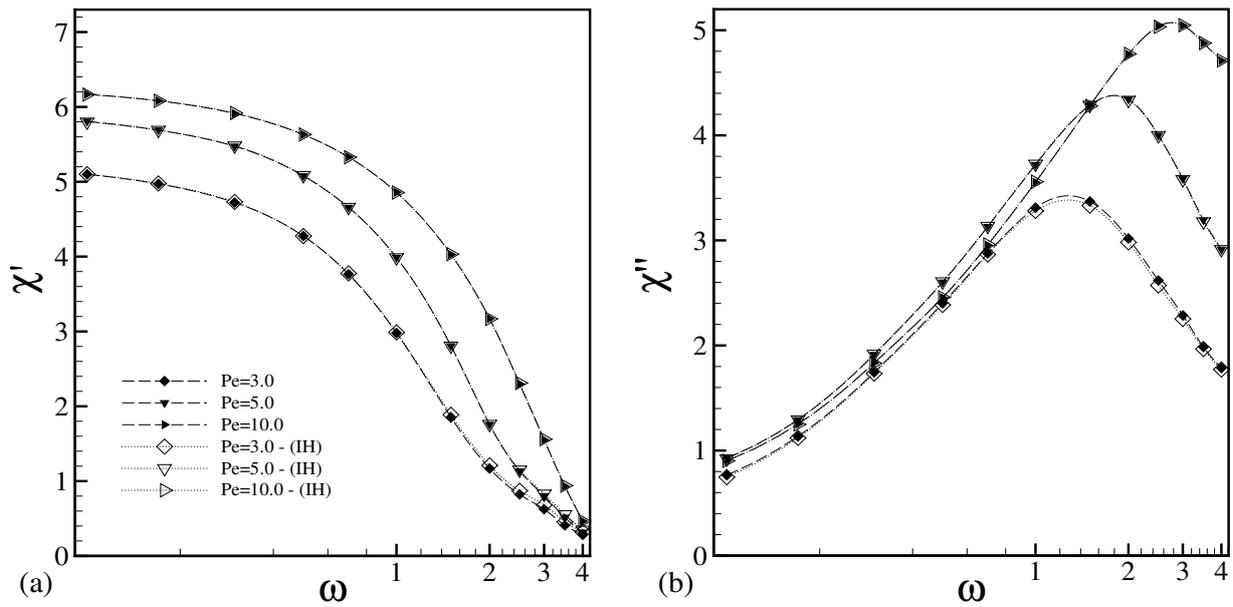


Figura 5.27: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa em função da frequência angular, ω , para vários Pe . Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE considerando IH. Outros parâmetros utilizados nas simulações são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$ e $\lambda = 1$. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.

O comportamento da parte imaginária da susceptibilidade complexa em função da fração volumétrica de partículas magnéticas, ϕ , é apresentado na figura (5.28). Considerou-se nas simulações $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Para destacar o desvio entre os resultados numéricos considerando IH e sem IH, é mostrado na figura os valores de ϕ a partir de 5%. Nota-se uma redução de χ'' na presença de IH em comparação com os valores sem IH. Essa diferença nos resultados aumenta para valores maiores de ϕ . Esse resultado menor para IH é consequência do efeito dispersivo das interações hidrodinâmicas, agindo na quebra de cadeia e agregados de partículas magnéticas, reduzindo o armazenamento de energia magnética e consequentemente diminuindo a dissipação de energia térmica representada pela parte imaginária da susceptibilidade complexa, χ'' . Dessa forma, a diferença entre os resultados vão crescendo à medida que ϕ aumenta, pois para grandes valores de ϕ , surge também uma elevação na formação de aglomerados de partículas, resultantes da intensificação das interações dipolares. Assim, além de um aumento do armazenamento da energia magnética pelas partículas, surge um acréscimo na dissipação de energia magnética,

como é observado em sua parte imaginária. A figura (5.29) mostra a influência de ϕ na parte imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s para $\omega = 2$ e $\omega = 6$ sem considerar IH. Devido a normalização da parte imaginária por χ_s , os resultados mostram especificamente os efeitos das interações dipolares em função da fração volumétrica de partículas, ϕ . Desta forma, para $\omega = 2$ nota-se um crescimento dos valores à medida que ϕ aumenta. De fato, à medida que ϕ cresce, as interações dipolares ficam mais intensas, tendendo para maiores formações de agregados e cadeias de partículas magnéticas. Porém, para $\omega = 6$ os valores dos resultados são aproximadamente constantes, sem efeito das interações dipolares com o aumento de ϕ . Como discutido anteriormente, para valores grandes de ω o tempo característico do campo magnético aplicado reduz, com isto, as partículas magnéticas passam a responder bem menos ao campo magnético oscilatório, reduzindo drasticamente o armazenamento de energia magnética e também sua dissipação térmica. Nota-se também um efeito nulo das interações dipolares.

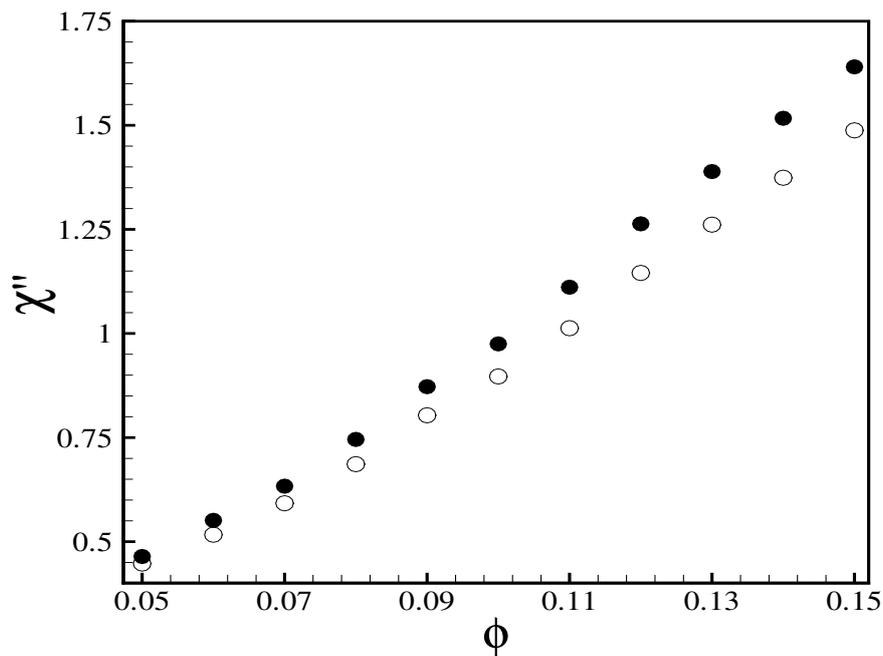


Figura 5.28: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH.

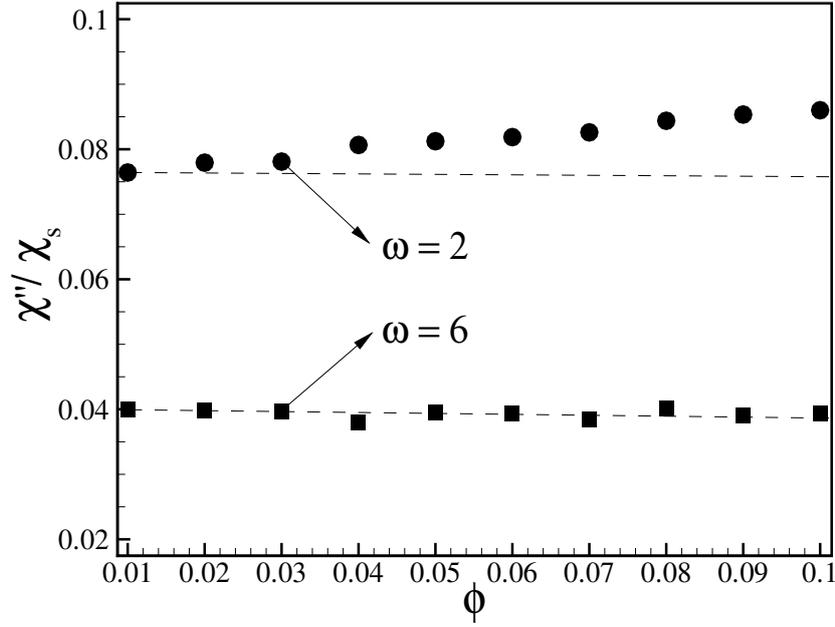


Figura 5.29: Parte imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE sem IH para $\omega = 2$ e os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE considerando IH e para $\omega = 6$.

A figura (5.30) mostra a parte imaginária da susceptibilidade complexa em função das interações dipolares entre partículas, λ com $\phi = 0.1$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Nota-se que à medida que o valor de λ aumenta, cresce a diferença entre os resultados com IH e sem IH dos valores de χ'' . É bem conhecido que as interações dipolares tendem a induzir formações de agregados e cadeias locais. Em contraste, a presença de interações hidrodinâmicas parece ser responsável por quebrar essas cadeias e agregados diminuindo a capacidade do fluido magnético em armazenar a energia do campo, resultando em uma magnetização mais baixa e conseqüentemente uma dissipação menor como mostra os resultados numéricos sem IH representados por círculos vazios. A figura (5.31) apresenta a parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de λ para $\phi = 0.1$, considerando $\omega = 1$ e $\omega = 6$, na ausência de interações hidrodinâmicas. Outros parâmetros usados nas simulações foram: $\alpha = 1$ e $Pe = 1$. Ao analisar o gráfico pode ser observado para $\omega = 1$ um aumento de χ'' com o crescimento de λ . Como detalhado no gráfico anterior (fig. 5.30), ao intensificar as interações dipolares entre as partículas, como resultado, ocorre um aumento de cadeias e

agregados de partículas magnéticas. Essa característica ocorre principalmente para frequências angulares relativamente baixas, pois o tempo característico das partículas magnéticas se equilibram com o tempo característico do campo oscilatório aplicado. Agora, já para $\omega = 6$, os resultados numéricos não variaram, e se mantiveram praticamente constantes com o aumento das interações dipolares. Isso ocorre, pois com o aumento da frequência angular, ω , o tempo característico do campo passa a ser menor com relação ao tempo de relaxação magnética das partículas. Assim, as partículas passam a responder menos ao campo aplicado com anulação dos efeitos das interações dipolares, sendo essas responsáveis pelo aumento de χ' e χ'' .

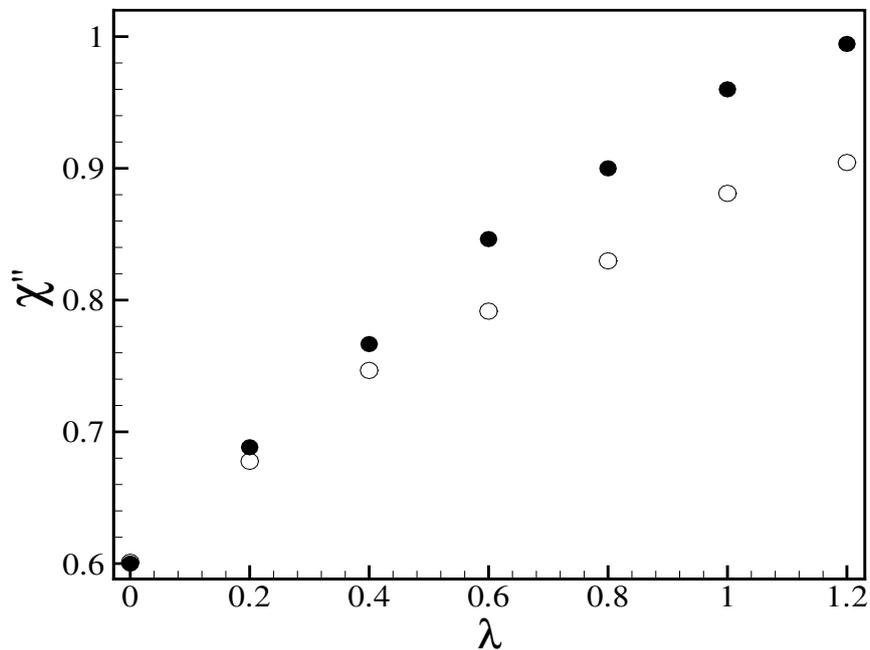


Figura 5.30: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de λ para $\alpha = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE na ausência de IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.

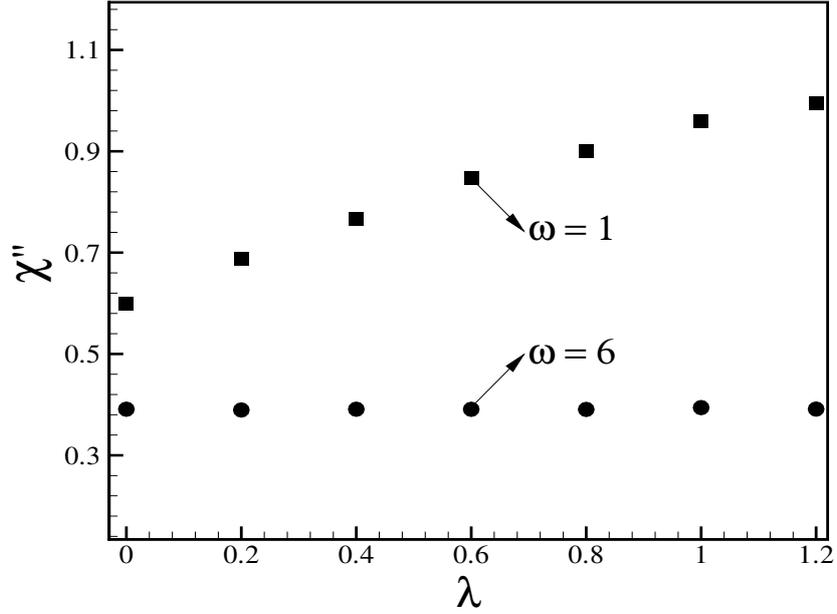


Figura 5.31: Parte imaginária da susceptibilidade complexa em função de λ para $\alpha = 1$, $\phi = 0.1$ e $Pe = 1$. Os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

A figura (5.32) mostra a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa normalizada pela susceptibilidade de saturação em função de α com $\phi = 0.01$ e três diferentes valores de Péclet, sem considerar interações hidrodinâmicas. Outros parâmetros usados na simulações foram $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Observa-se um crescimento na parte real normalizada da susceptibilidade complexa com o aumento de α até saturar-se. Esse comportamento se apresenta para os três valores de Péclet usados nas simulações, sendo $Pe = 1, 1.5$ e 2 . Ainda ao analisar a parte real, os valores são maiores para Pe maiores. Para $Pe = 1.5$ e $Pe = 2$ os valores da parte real, que estão relacionados com o armazenamento de energia magnética, vão se aproximando com o aumento de α . Além disso, esse efeito pode ser observado na parte imaginária normalizada da susceptibilidade complexa. Nota-se um aumento de χ''/χ_s , até atingir um valor máximo, e em sequência decresce para valores maiores de α . Esse comportamento foi apresentado para os três valores de Péclet. A figura (5.33) apresenta o mesmo comportamento descrito anteriormente. Considerou-se nas simulações $Pe = 3, Pe = 4, Pe = 5$ e $Pe = 6$ e para os outros parâmetros os mesmos do resultado anterior. Nota-se tanto em χ'/χ_s quanto em χ''/χ_s uma aproximação dos valores à medida

que α aumenta. Esse comportamento foi apresentado anteriormente na figura (5.32). Além disso, com o aumento de α o campo magnético oscilatório passa a dominar outros mecanismos físicos que influenciam o movimento da partícula. Assim, mesmo com o crescimento de Pe , os resultados para grandes α ($\alpha > 4$) praticamente não variam em χ'/χ_s . Porém, como mostra o encarte, para $4 \leq \alpha \leq 10$ em χ''/χ_s , os resultados numéricos se invertem e tornam-se menores para Pe maiores. Dessa forma, com a elevação de Pe , tem-se também implicitamente um crescimento pequeno no tamanho das partículas, aumentando o seu tempo de relaxação magnética.

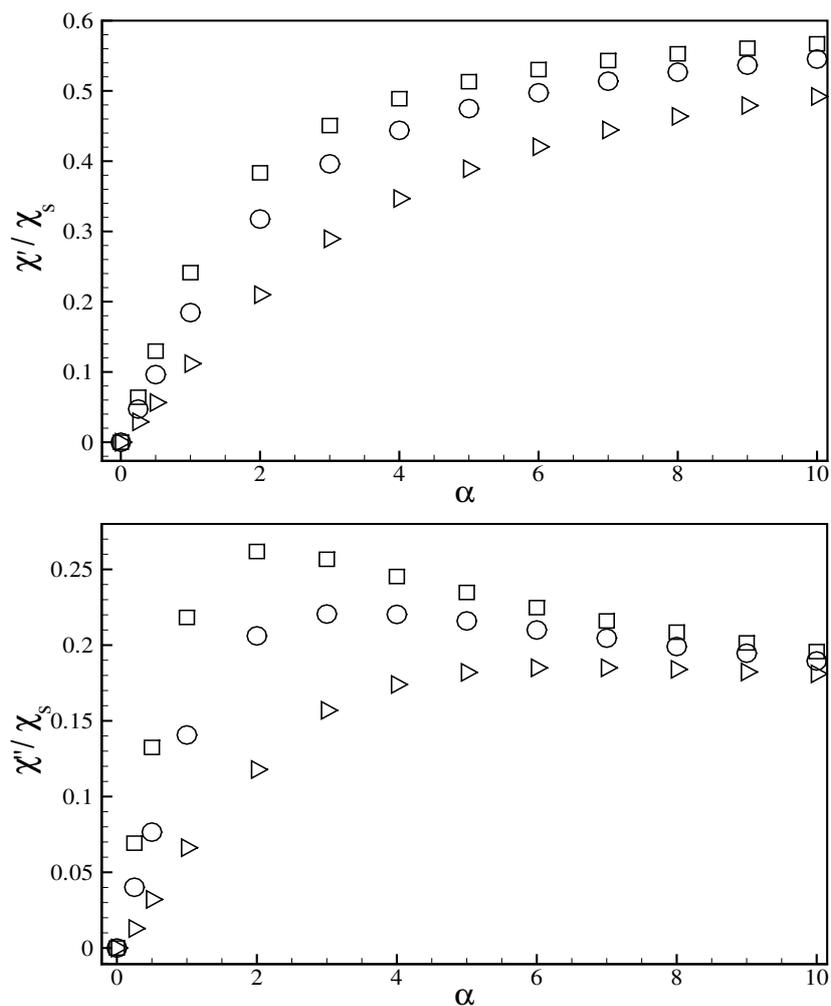


Figura 5.32: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de α para $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH, sendo os triângulos com $Pe = 1$, círculos com $Pe = 1.5$ e quadrados com $Pe = 2$.

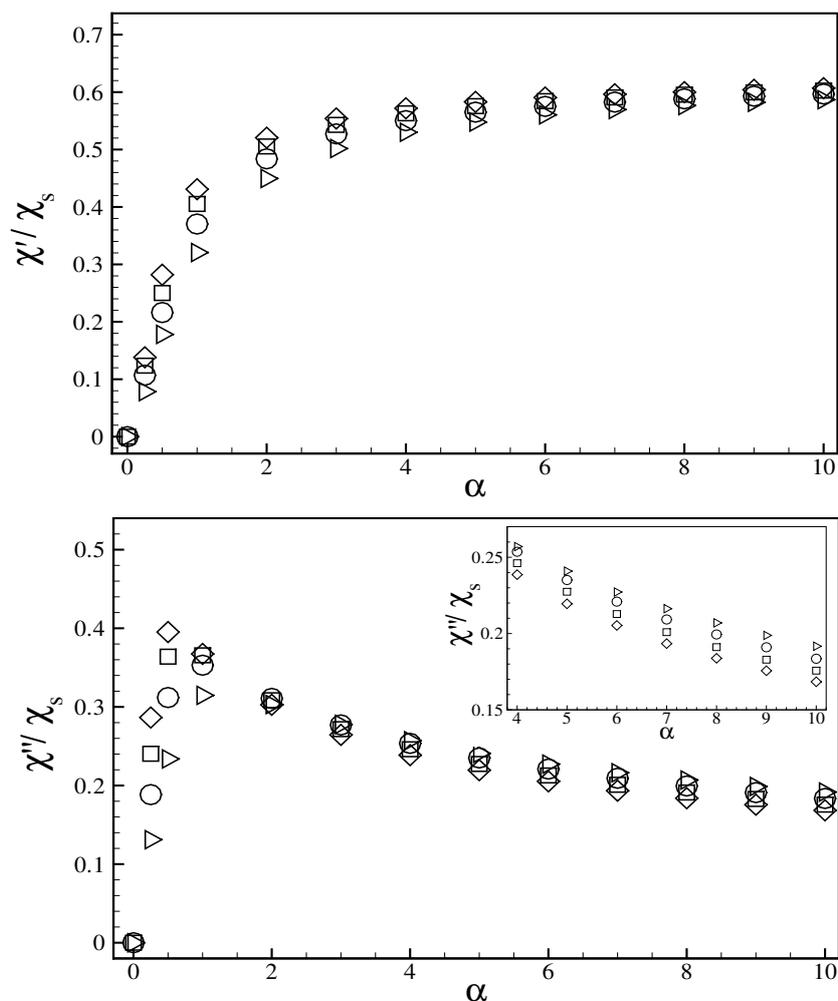


Figura 5.33: Parte real e imaginária da susceptibilidade complexa normalizada por χ_s em função de α para $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH, sendo os triângulos com $Pe = 3$, círculos com $Pe = 4$, quadrados com $Pe = 5$ e losangos com $Pe = 6$. O encarte mostra o detalhe dos resultados numéricos para $4 \leq \alpha \leq 10$.

5.5 Curvas de Histerese e Diagramas de Fase

A figura (5.34) mostra curvas de histerese comparando o resultado analítico, com linha contínua e o resultado numérico, com quadrados abertos. Considerou-se nos resultados $\phi = 0.10$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$, $\alpha = 1$ e $Pe = 1$. Nota-se uma boa concordância entre os resultados numéricos obtidos com o método SE e o resultado analítico. Essa comparação

serve também como uma validação dos resultados numéricos. A área formada pela curva de histerese representa a dissipação de energia magnética na forma de calor e de acordo com Carrey et al. (2011), todas as perdas térmicas de partículas magnéticas submetidas a um campo magnético oscilatório, são perdas por histerese.

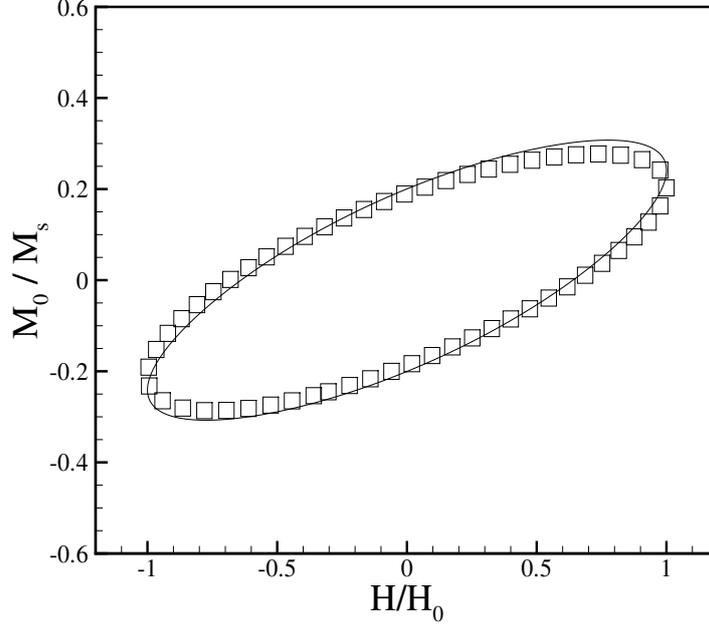


Figura 5.34: Curvas de histerese para $\phi = 0.1$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico e os quadrados abertos representam o resultado numérico.

A curva de histerese da figura (5.35) mostra a comparação entre o resultado numérico obtido sem interações dipolares ($\lambda = 0$) e o resultado numérico obtido considerando interações dipolares ($\lambda = 1$). Nota-se a influência das interações dipolares entre as partículas na dissipação térmica. Destaca-se que este resultado é para baixos valores de ω como neste caso apresentado. Porém, para valores grandes de ω , as partículas não respondem ao campo magnético aplicado, provocando uma inibição dos efeitos das interações dipolares como foi mostrado anteriormente na figura (5.28). Como observado na figura (5.35), uma forma de aumentar a dissipação térmica pela suspensão, é aumentando a área formada pela curva de histerese, por meio de interações dipolares entre partículas magnéticas. Observa-se no gráfico, com a mudança de $\lambda = 0$ para $\lambda = 1$ a magnetização remanente cresce de M_{r1} para M_{r2} e o campo coercivo de H_{c1} para H_{c2} aumentando a área formada pela curva de

histerese. Dessa forma, as interações dipolares entre partículas intensificam a dissipação de energia magnética na forma de calor. De fato, com o aumento de λ eleva-se também as formações de cadeias e agregados de partículas acarretando um crescimento no armazenamento de energia magnética. Isso explica o aumento da magnetização remanente de M_{r_1} para M_{r_2} . Em consequência disso, o campo magnético precisa de um campo coercivo maior para que a magnetização se anule, provocando uma dissipação térmica maior.

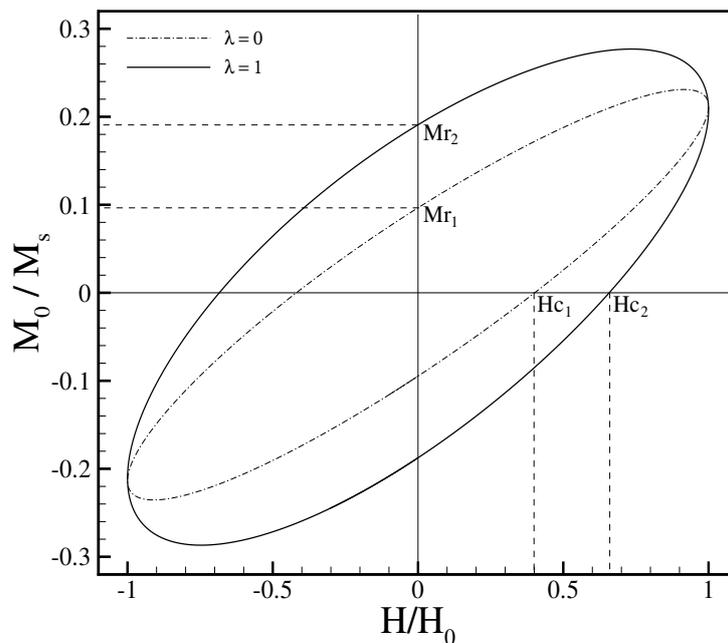


Figura 5.35: Curvas de histerese para $\phi = 0.1$, $\omega = 1$, $\alpha = 1$ e $Pe = 1$, obtidas por meio dos resultados numéricos.

A figura (5.36) mostra o diagrama de fase, a curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. As simulações foram realizadas com $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 1$ e $\phi = 0.1$, considerando interações hidrodinâmicas. Nas figuras 5.36(a) e 5.36(b) com parâmetro $Pe = 1$, apresentaram comportamentos lineares, como pode ser observado pelo diagrama de fase circular e uma curva de histerese elíptica. Esse comportamento elíptico da curva de histerese é descrito pela teoria da resposta linear da magnetização (Rosensweig, 2002). Além disso a fig. 5.36(c) apresenta uma magnetização de equilíbrio com resposta senoidal para um campo magnético igualmente senoidal, mas com um atraso de fase. A figura 5.36(d) e 5.36(e) ambas com $Pe = 2$, apresentam efeitos não lineares, com uma pequena deformação no diagrama de fase e também uma curva de histerese não elíptica. Dessa forma,

para valores maiores de Péclet a magnetização de equilíbrio se desvia da resposta senoidal do campo magnético aplicado, apresentando assim mesmo um comportamento periódico temporal como mostrado na figura 5.36(f).

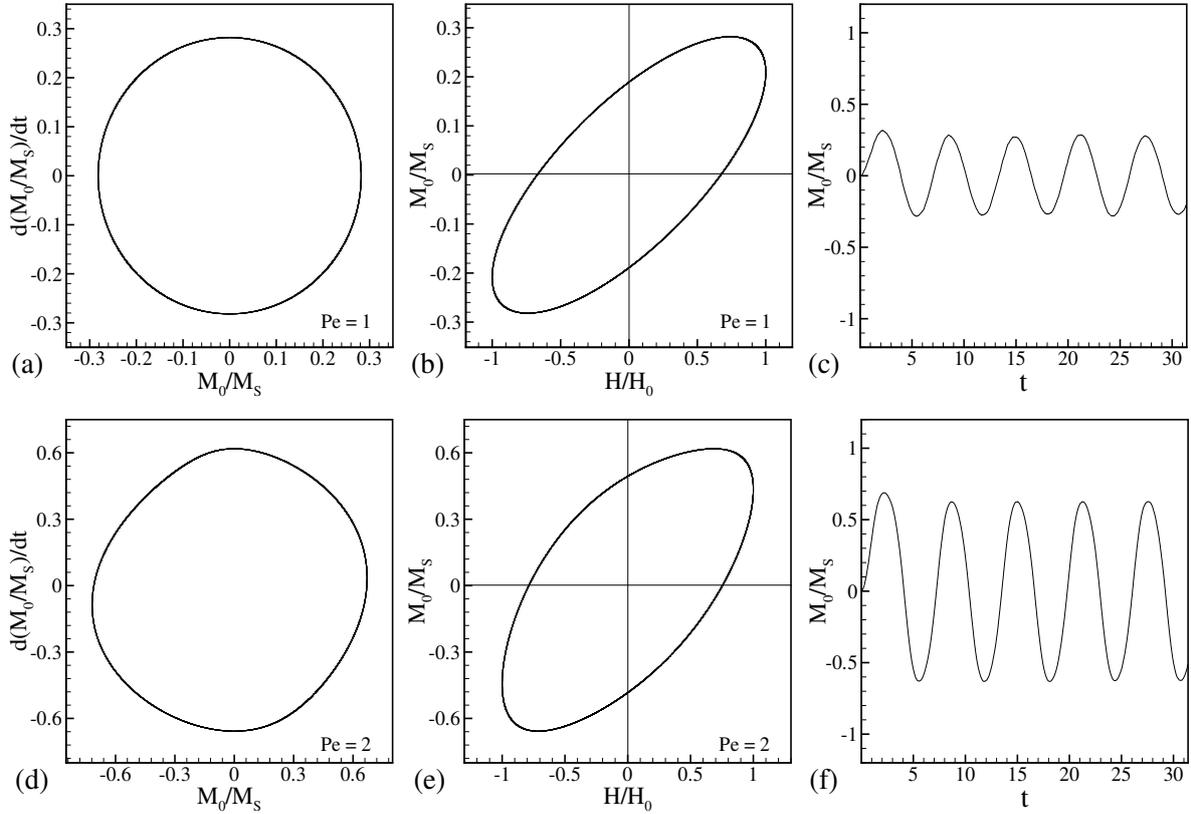


Figura 5.36: Na seqüência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 2$ na presença de IH.

A figura (5.37), mostra o resultado de simulações realizadas para $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 1$ e $\phi = 0.1$, com $Pe = 10$ e $Pe = 15$. Note que o diagrama de fase dado na figura 5.37(a) e 5.37(d) e a curva de histerese mostrada na figura 5.37(b) e 5.37(e), apresentam-se ainda mais evidente uma não linearidade na resposta com o campo magnético aplicado. Essa não linearidade é mostrada também na figura 5.37(c) e 5.37(f). Portanto, observa-se o seguinte sinal temporal: o sistema é estimulado com um sinal harmônico periódico, respondendo de

forma não linear para maiores números de Péclet e convergindo-se para uma onda quadrática. Basicamente para maiores Péclet as partículas atingem ao longo do processo temporal, um estado de saturação da magnetização levando a um achatamento da onda.

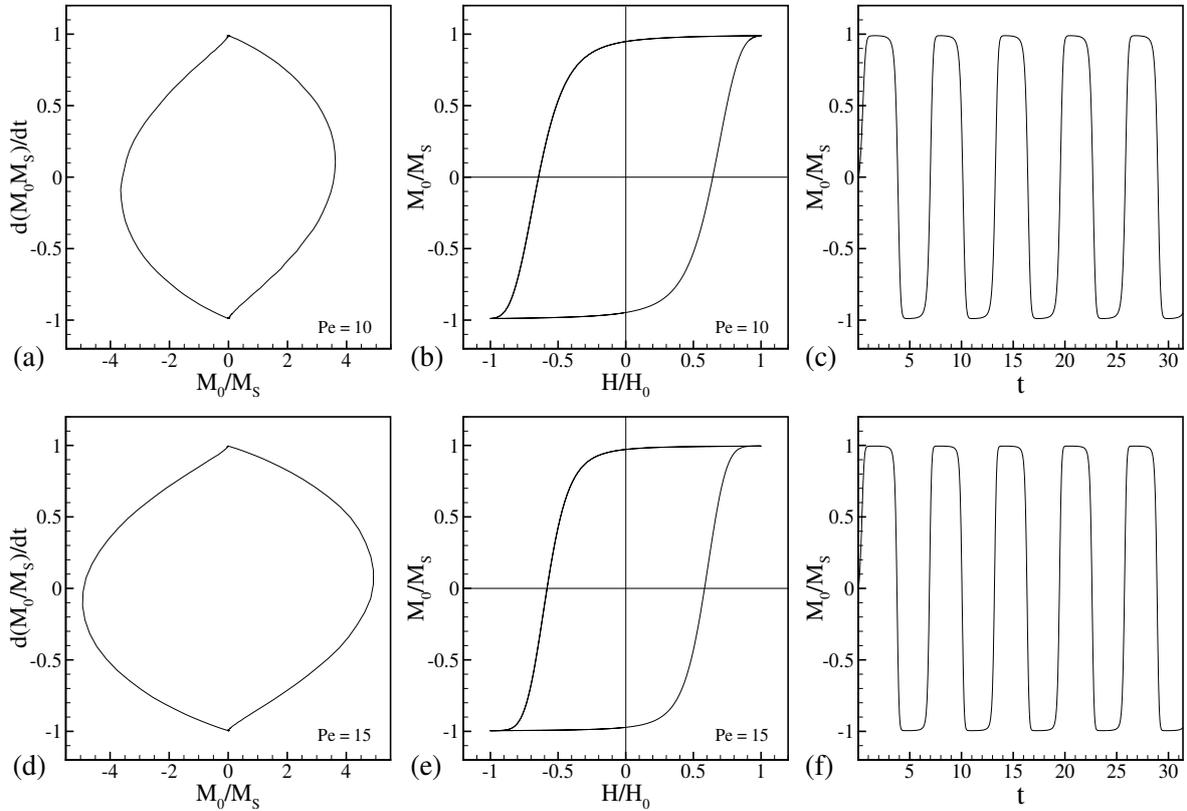


Figura 5.37: Na sequência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 10$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 15$ na presença de IH.

A figura (5.38), mostra o resultado de simulações realizadas para $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 2$ e $\phi = 0.1$, com $Pe = 10$ e $Pe = 15$. Na sequência a figura (5.39), apresenta o resultado de simulações realizadas para $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 2$ e $\phi = 0.1$, com $Pe = 10$ e $Pe = 15$. Os comportamentos apresentados nos gráficos foram detalhados anteriormente na análise dos resultados da figura (5.36) e (5.37).

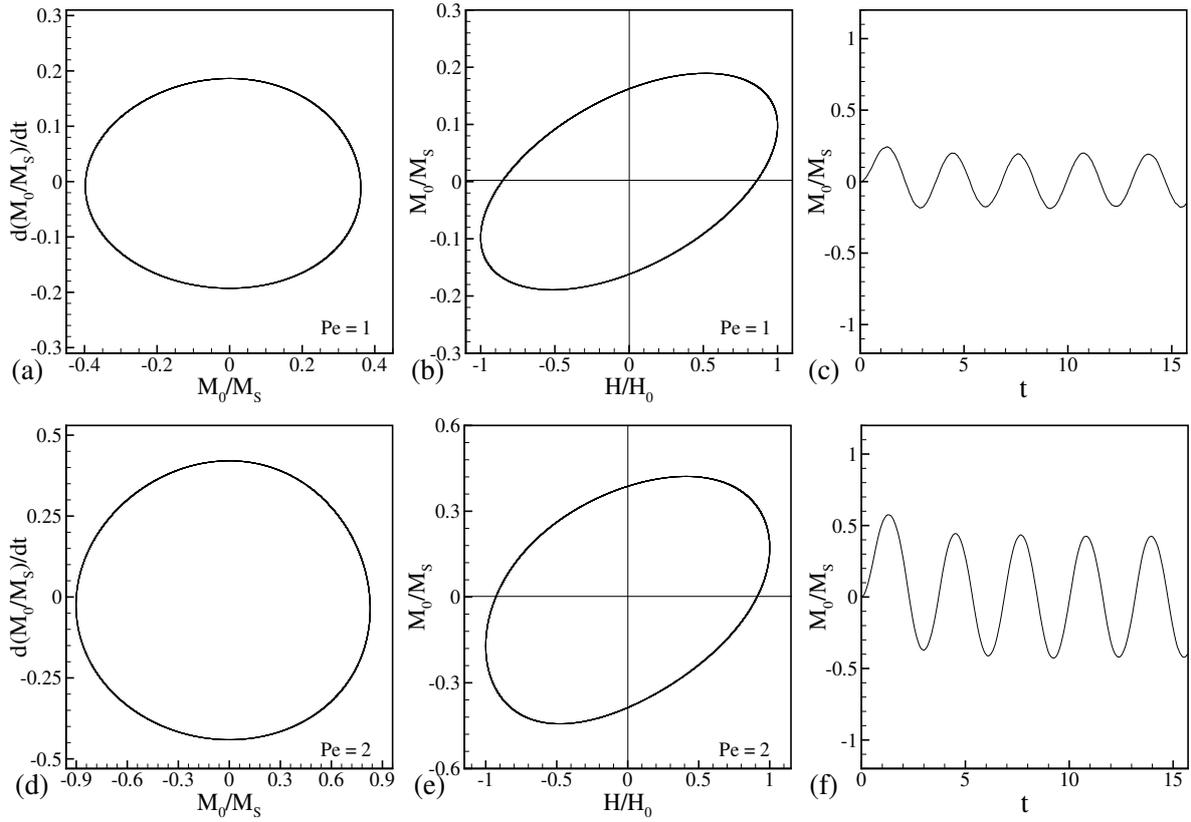


Figura 5.38: Na seqüência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 1$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 2$ na presença de IH.

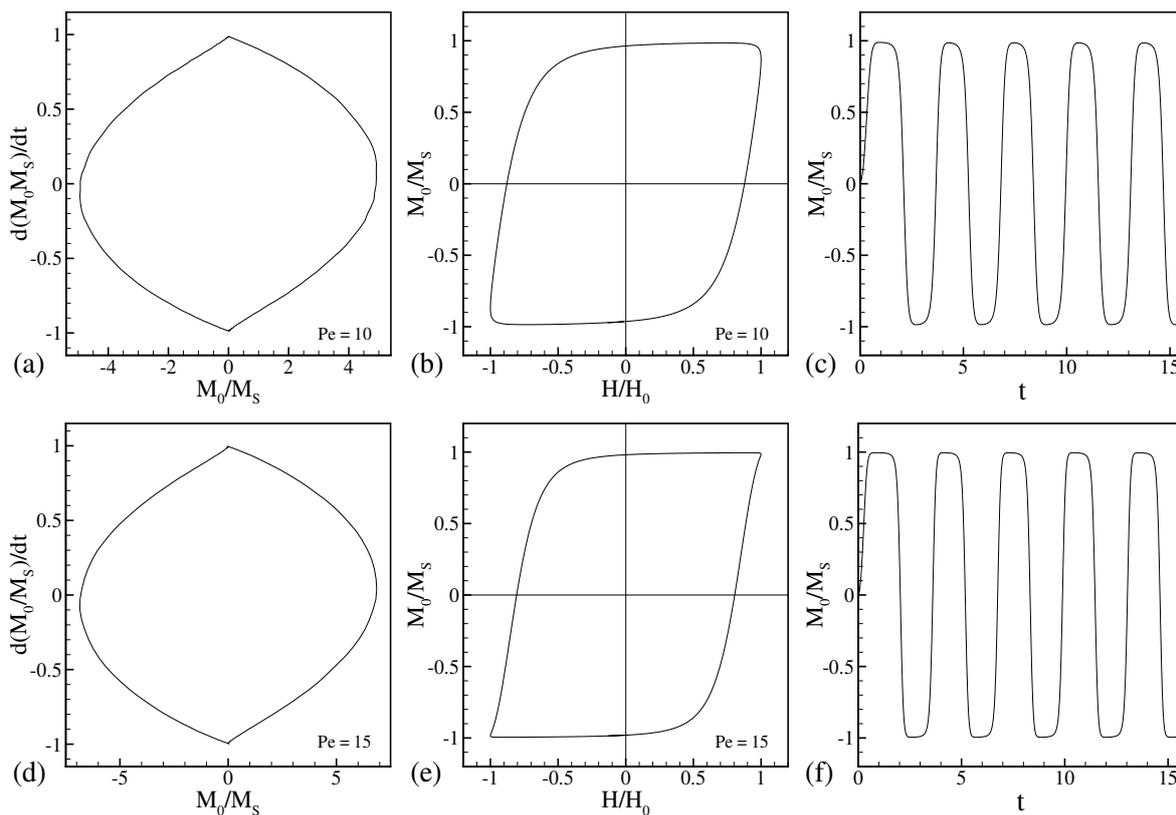


Figura 5.39: Na seqüência, diagrama de fase da magnetização de equilíbrio, curva de histerese e a magnetização de equilíbrio em função do tempo. Os parâmetros utilizados nas simulações em (a), (b) e (c) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 10$ na presença de IH. Os parâmetros utilizados nas simulações em (d), (e) e (f) são $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\omega = 2$ e $Pe = 15$ na presença de IH.

As figuras (5.40) e (5.41) mostram respectivamente para $\omega = 1$ e $\omega = 2$ os diagramas de fases e curvas de histerese da magnetização de equilíbrio para vários números de Péclet. As simulações foram realizadas para $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $\phi = 0.1$, considerando as interações hidrodinâmicas. Note que, conforme o aumento do número de Péclet, surge uma mudança tanto nos diagramas de fases quanto nas curvas de histerese indicando uma não linearidade na resposta da magnetização com o campo magnético oscilatório aplicado. Ao comparar as áreas entre as curvas de histerese, é observado um aumento para números maiores de Péclet até que um máximo seja atingido. Após esse valor máximo, as áreas entre as curvas de histerese decrescem. Essa diferença entre as áreas indica uma mudança no tempo de relaxação magnética das partículas, representado no problema pelo número de Péclet. Em

termos práticos, o número de Péclet pode ser controlado variando o diâmetro da partícula, mas também está relacionado à sensibilidade das partículas em sentir efeitos hidrodinâmicos. Para que uma partícula perceba a influência do líquido circundante em sua própria mobilidade, ela deve ser pequena o suficiente para que o limite do escoamento de Stokes (onde as interações hidrodinâmicas são mais fortes) seja alcançado, mas grande o suficiente para efeitos brownianos relacionados às flutuações térmicas das moléculas do líquido não impeça a percepção dos fenômenos hidrodinâmicos.

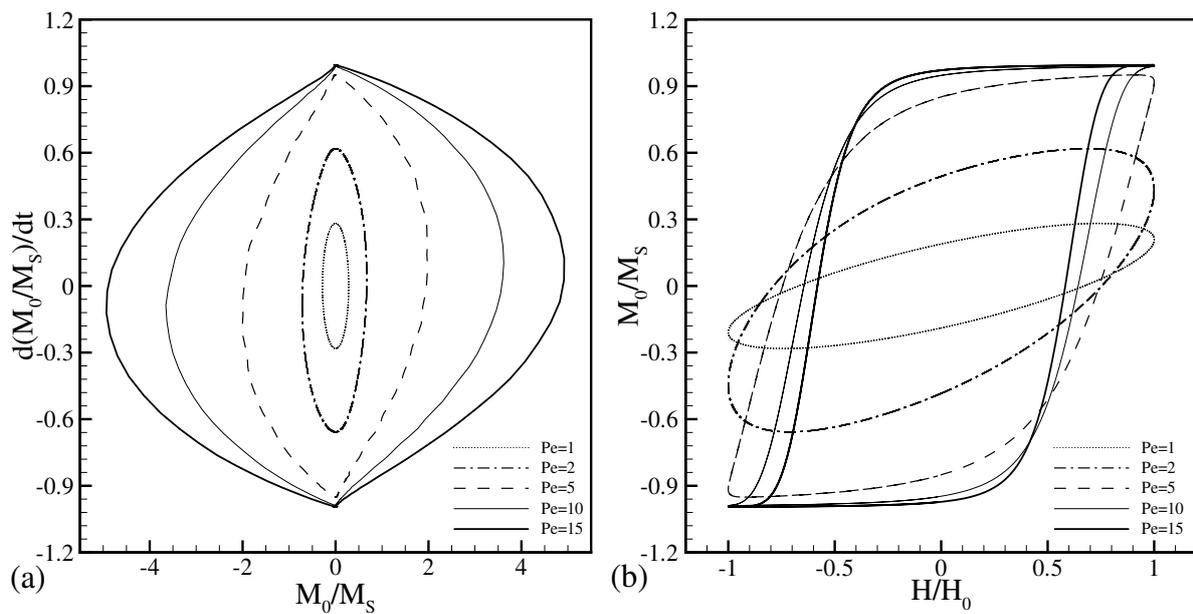


Figura 5.40: (a): diagramas de fase e (b): curvas de histerese da magnetização de equilíbrio para vários Pe . Outros parâmetros físicos utilizados nestas simulações são $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.10$ e $\omega = 1$ na presença de IH.

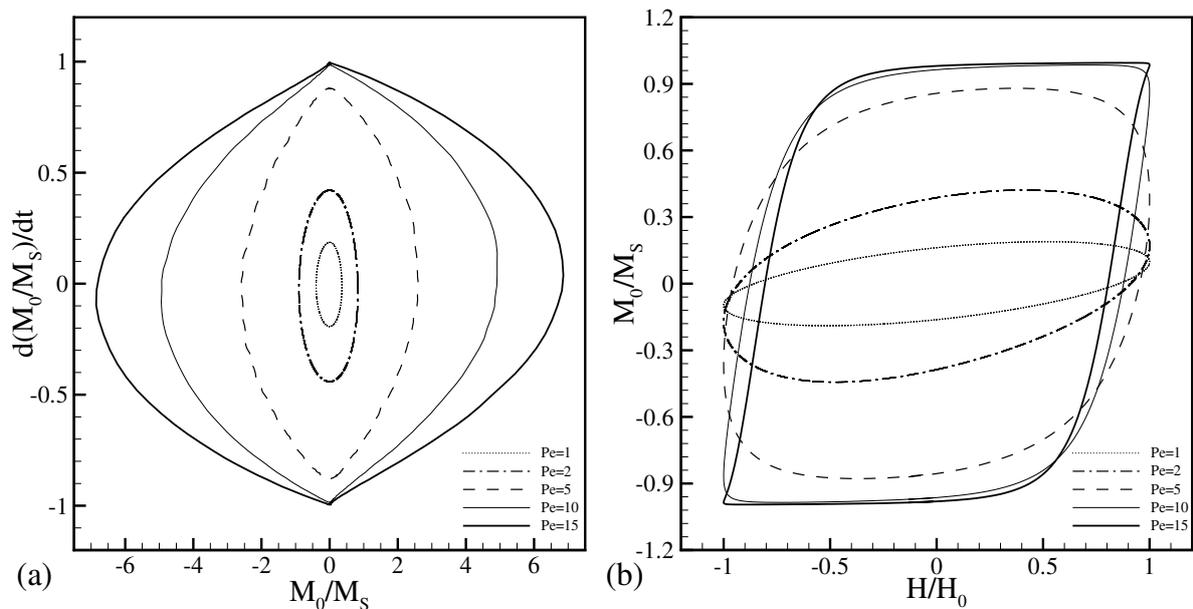


Figura 5.41: (a): diagramas de fase e (b): curvas de histerese da magnetização de equilíbrio para vários Pe . Outros parâmetros físicos utilizados nestas simulações são $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.10$ e $\omega = 2$ na presença de IH.

A figura (5.42) mostra o valor da área da curva de histerese normalizada pela área máxima em função do número de Péclet. Considerou-se nas simulações $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $\phi = 0.1$. Nota-se nas comparações dos resultados com interações hidrodinâmicas e sem interações hidrodinâmicas, uma diferença principalmente para $Pe = 1$. Para valores maiores de Péclet os resultados se aproximam, não apresentando diferenças expressivas. A área normalizada pela área máxima pode ser escrita em termos da parte imaginária da susceptibilidade complexa, como $A/A_{max} = \chi''/\chi''_{max}$. Dessa forma, a área entre a curva de histerese significa a quantidade de energia magnética dissipada na forma de calor em um ciclo. De acordo com a figura (5.42) para cada frequência angular ω , existe um valor máximo de dissipação de energia magnética, associado a um determinado número de Péclet.

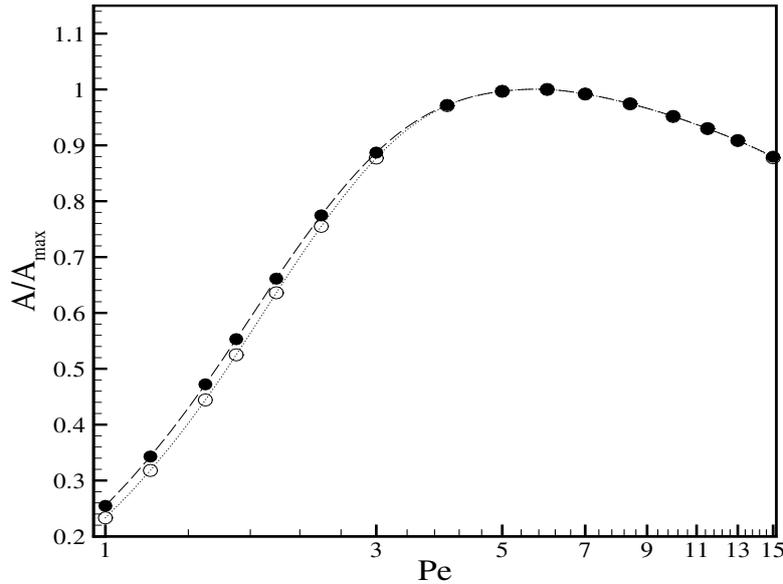


Figura 5.42: Área de histerese normalizada pelo máximo em função de Pe para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH. As linhas tracejadas e pontilhadas ligando os pontos tem como objetivo melhorar a visualização.

A figura (5.43) mostra a comparação entre o resultado analítico, com linha contínua, e resultado numérico, com losangos abertos, de curvas de histeres para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$, $\omega = 1$ e $Pe = 1$, obtidas sem IH. Nota-se uma boa concordância entre os resultados numéricos obtidos com o método SE e o resultado analítico. Foi considerado $\omega = 1$ em 5.43(a), apresentando-se uma curva de histerese do tipo elipsoidal descrita pela teoria da resposta linear (Rosensweig, 2002). A área formada pela curva de histerese representa, como descrita em (4.3), uma dissipação de energia magnética na forma de calor, pois as partículas magnéticas ainda com energia magnética armazenadas mesmo com o campo magnético aplicado igualmente nulo, é forçada a dissipar essa energia pelo campo aplicado quando a sua direção é invertida. Dessa forma, as partículas magnéticas da suspensão dissipa essa energia na forma de calor até torna-se a magnetização nula novamente através de campo aplicado definido por campo coercivo (figura 4.6). Uma forma de aumentar essa energia dissipada na forma de calor é aumentando o tamanho da área da curva de histerese, através por exemplo, da amplitude do campo aplicado por meio do parâmetro α . Dessa

forma, como mostra a figura 5.43(b), para $\alpha = 5$ é apresentada uma área formada pela curva de histerese, bem maior e conseqüentemente uma dissipação térmica mais elevada que na figura 5.43(a). Mas esse aumento da área decorrente do crescimento da amplitude do campo aplicado, para aplicações biomédicas como a magnetohipertermia em seres humanos não seria tão simples, pois o organismo tem um limite de tolerância da intensidade do campo magnético aplicado. Assim, um campo magnético muito intenso, isto é, com uma grande amplitude, por exemplo, poderia causar danos indesejáveis ao organismo exposto a aplicação (Pankhurst et al., 2003).

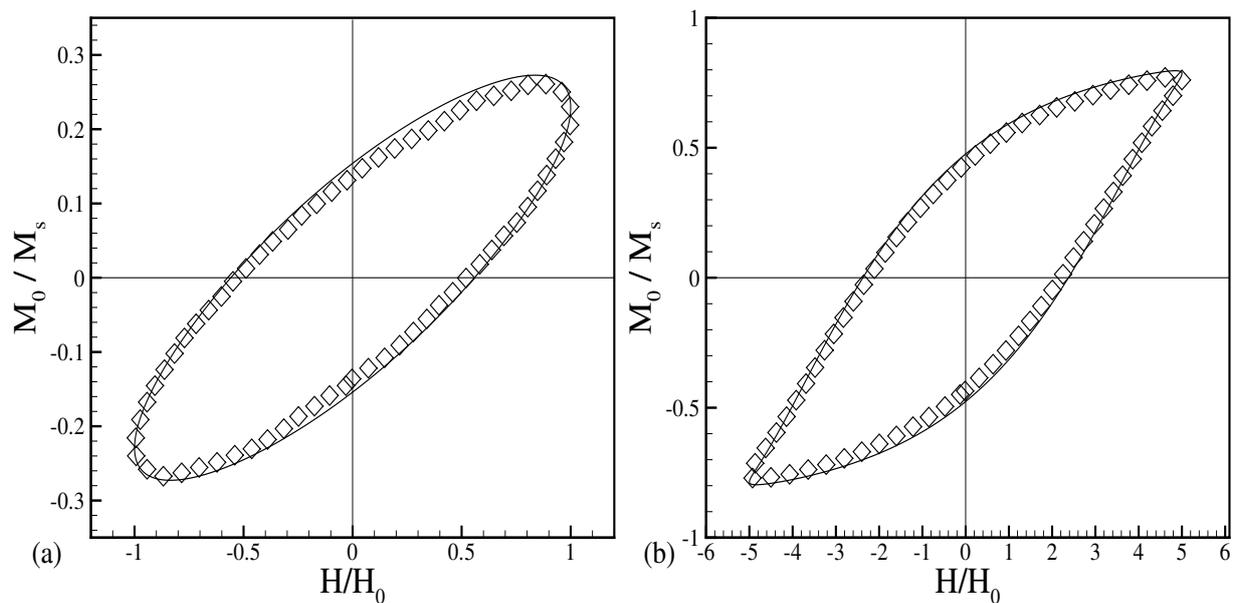


Figura 5.43: Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. Resultado analítico representado por linha contínua e o resultado numérico, representado por losangos abertos. Na fig. (a) considerou-se nas simulações $\alpha = 1$ e na fig. (b) com $\alpha = 5$.

A figura (5.44) mostra curvas de histerese obtidas por meio dos resultados numéricos com SE considerando interações dipolares entre partículas magnéticas e sem IH para $\phi = 0.01$. Nota-se para $\alpha = 1$ apresentado por linha traço-ponto uma curva de histerese elipsoidal. Essa curva elipsoidal já foi analisada anteriormente, juntamente com a curva de histerese para $\alpha = 5$. Também é mostrado uma curva de histerese para $\alpha = 10$ apresentando-se uma área bem maior em conseqüência de sua amplitude. Nota-se para grandes amplitudes um comportamento bem diferente do elipsoidal. Dessa forma, com aumento da amplitude

a magnetização passa do regime linear para o regime não linear, apresentando-se esse aspecto mais clássico de curva de histerese com o aumento do campo magnético coercivo e magnetização remanente.

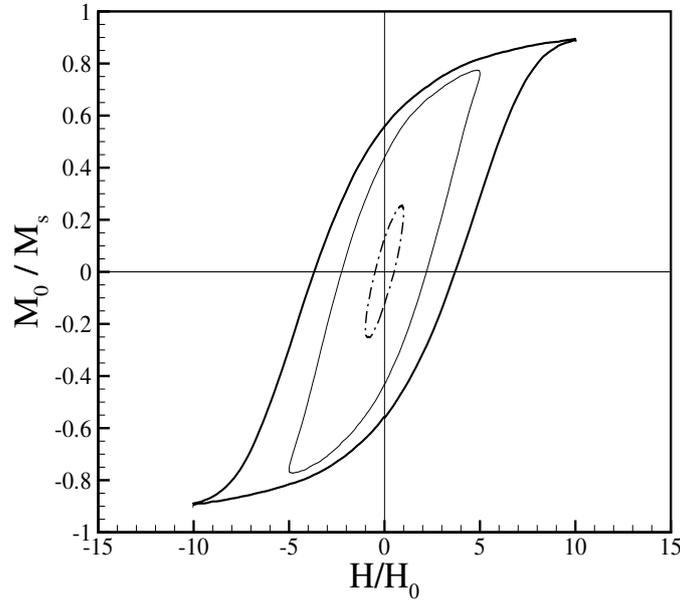


Figura 5.44: Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos. A linha traço ponto representa o resultado numérico para $\alpha = 1$, a linha contínua fina para $\alpha = 5$ e a linha contínua grossa para $\alpha = 10$.

Uma outra forma de aumentar a área da curva de histerese é através do número de Péclet. Observe na figura (5.45) as curvas de histerese para $\phi = 0.01$ obtida por meio dos resultados numéricos, considerando três valores diferentes de números de Péclet. Nas simulações foram considerados $\alpha = 1$ e $\omega = 1$, resultando numas curvas de histerese tipo elipsoidal, ou seja, pertencentes a um regime linear mesmo aumentando o número de Péclet. Nota-se também um crescimento tanto no campo coercivo quanto na magnetização remanente provocando um aumento da área sob a curva, como pode ser observado na figura. Esse resultado é interessante, pois mesmo mantendo uma frequência angular e amplitude de campo constantes, é possível obter um aumento na dissipação de energia magnética na forma de calor variando o número de Péclet. Observe que o o número de Péclet tem uma grande influência no movimento rotacional das partículas. Um aumento em Pe representa uma escala de tempo browniana mais alta quando comparada com a escala de tempo de

relaxação das partículas, de modo que as partículas são menos sensíveis ao movimento browniano. Isso sugere uma melhora na dissipação de calor com um pequeno aumento do diâmetro da partícula, e assim, reduzir os efeitos da difusão browniana sobre as partículas, produzindo um aumento no armazenamento de energia magnética e também uma maior dissipação térmica.

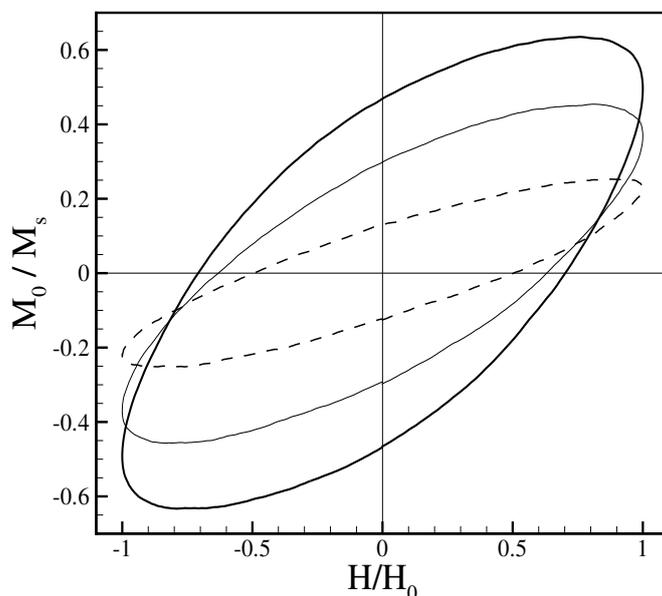


Figura 5.45: Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $\alpha = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos. A linha traçada representa o resultado numérico para $Pe = 1$, a linha contínua fina para $Pe = 1.5$ e a linha contínua grossa para $Pe = 2$.

A figura (5.46) mostra curvas de histerese para diferentes valores de ω . As curvas foram obtidas através dos resultados numéricos para $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem IH. Na figura 5.46(a), nota-se para $\omega = 0.1$ uma curva de histerese muito estreita. De fato, para valores de ω pequenos o tempo característico do campo oscilatório é muito maior que o tempo de relaxação das partículas. Assim, as partículas passam a responder bem melhor ao campo magnético oscilatório estando mais em fase com o campo. Isso leva a um aumento no armazenamento de energia magnética com pouca perda na forma de calor como indica o estreitamento da curva de histerese. Observando a figura percebe-se um campo coercivo e magnetização remanente bem pequenos, isso significa que as partículas não precisam de um esforço a mais pelo campo aplicado para anular a magnetização que está quase total-

mente em fase com o campo magnético aplicado. À medida que se aumenta o valor de ω as áreas das curvas de histerese se tornam maiores até atingir um máximo como mostra a figura. Observa-se que o máximo é atingido para $\omega = 1$ e posteriormente as áreas formadas pelas curvas de histerese vão reduzindo para ω maiores como é mostrado na figura (5.46)(b). Nota-se para ω grande uma diminuição principalmente no campo remanente da curva de histerese e também no seu valor máximo da curva, isso indica, que as partículas estão armazenando e dissipando bem menos energia magnética num ciclo. De fato, para ω grande o tempo característico do campo magnético aplicado é bem menor que o tempo de resposta da partícula, que passa a ter dificuldades em seguir o movimento oscilatório do campo influenciando na redução da magnetização da suspensão.

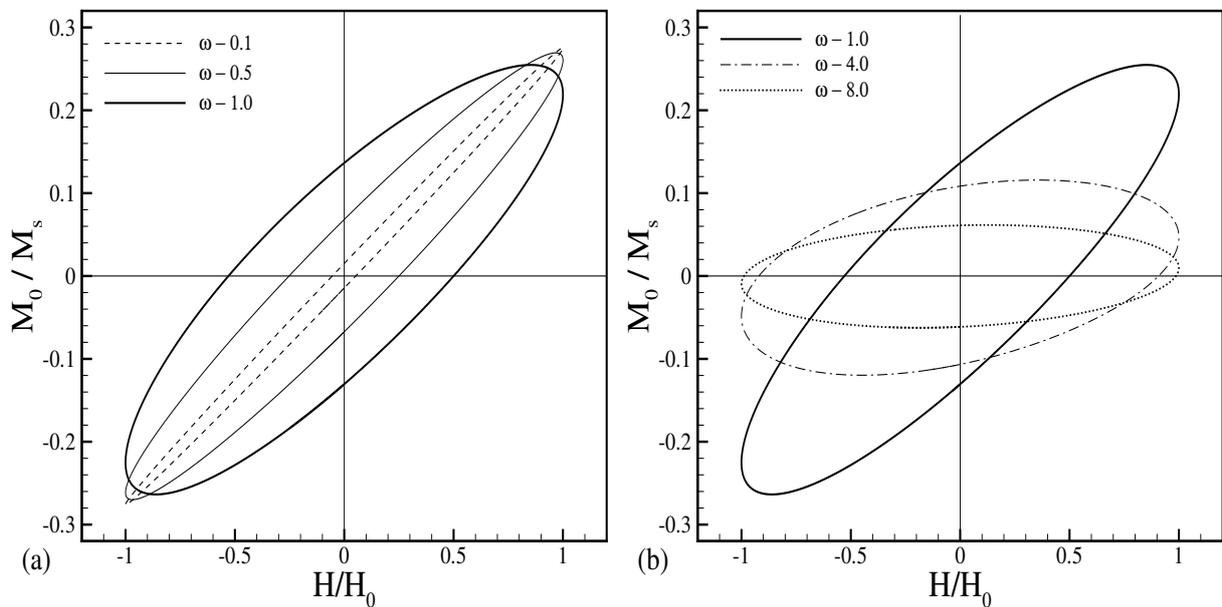


Figura 5.46: Curvas de histerese para $\phi = 0.01$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ obtidas por meio dos resultados numéricos.

CAPÍTULO 6

MAGNETOHIPERTERMIA

Neste capítulo é apresentado um modelo para obtenção da taxa média de aumento de temperatura em magnetohipertermia. Para isso, foi proposto primeiramente um cálculo híbrido baseado em simulações discretas de dinâmica de Langevin para determinar a magnetização combinando com uma descrição contínua da região tumoral (isto é, um modelo concentrado), com o propósito de avaliar o aumento da temperatura dentro da região. Em seguida, são apresentados os resultados numéricos para magnetohipertermia e comparados com a teoria assintótica para alguns parâmetros como forma de validação.

6.1 Formulação para Taxa Média de Aumento de Temperatura em Magnetohipertermia

Considera-se primeiramente uma região esférica de raio R_ϵ composta de partículas magnéticas de raio a , densidade ρ_s , calor específico c_s e de um líquido ambiente de densidade ρ_0 e calor específico c_0 . O raio R_ϵ é grande o suficiente para conter um grande número de partículas magnéticas, mas pequeno o suficiente para que as variações espaciais de temperatura dentro da região de raio R_ϵ possam ser desprezadas. Dessa forma, sob essas condições,

é proposto um modelo para prever a taxa média de aumento de temperatura dentro de um pequeno tumor de meio equivalente esférico, submetido à magnetohipertermia induzida pela presença de nanopartículas magnéticas suspensas, expostas a um campo magnético oscilatório de amplitude uniforme. A figura (6.1) mostra um modelo tumoral concentrado e com partículas magnéticas submetidas a um campo magnético senoidal.

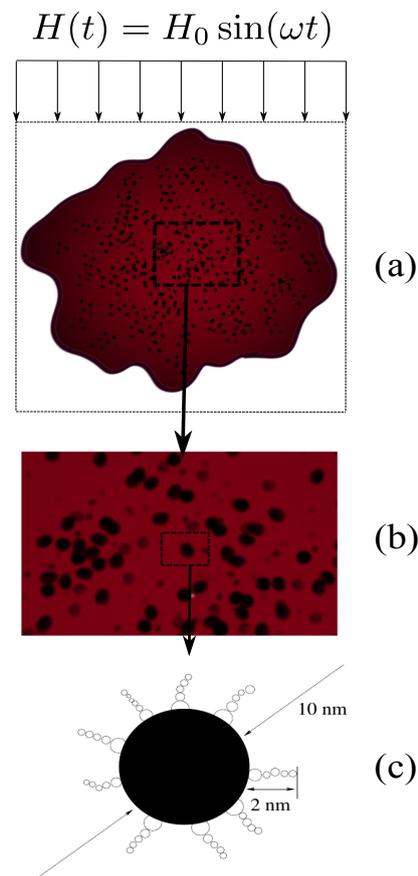


Figura 6.1: Esboço de um modelo prototípico para magnetohipertermia: (a) mostra um tumor impregnado com partículas magnéticas sob ação de um campo magnético oscilatório, (b) mostra uma ampliação de uma região típica dentro do tumor com as partículas magnéticas e (c) detalhe de uma partícula magnética típica com uma camada de surfactante, a fim de evitar a formação de aglomerados (Figura desenvolvida pelo prof. Rafael Gabler).

Portanto, neste trabalho é mostrado como a taxa média de aumento de temperatura no tempo, $\langle d\theta/dt \rangle$, depende da frequência angular adimensional, do parâmetro de interação campo - partícula, denotado por α , interação dipolar entre partículas, λ , do número de

Peclét, Pe e da fração volumétrica de partículas, ϕ , dentro do tumor. A parte imaginária da susceptibilidade complexa do fluido magnético, χ'' , está relacionada com a dissipação de energia magnética na forma de calor, conseqüentemente, é a quantidade principal para prever a taxa média de aumento de temperatura no tempo (Rosensweig, 2002; Kappiyoor et al., 2010; Zubarev et al., 2017). Na presente abordagem, χ'' é calculado em termos da magnetização adimensional, $M_z(t)$, na região tumoral (modelo concentrado), por meio de simulações discretas com o método Dinâmica de Langevin.

Na literatura atual sobre magnetohipertermia indica que quando a temperatura está entre $42^\circ\text{C} - 48^\circ\text{C}$, a taxa de morte de células cancerígenas aumenta ligeiramente enquanto as células saudáveis sobrevivem devido a sua maior capacidade térmica (Maenosono e Saita, 2006). Assim, é importante examinar a influência dos parâmetros físicos descritos acima no método terapêutico de magnetohipertermia.

O equilíbrio térmico total da taxa de energia por unidade de volume em uma região contínua R_ϵ de condutividade térmica efetiva k_e , densidade ρ_e e calor específico c_e é dado por (Batchelor, 1967)

$$\rho_e c_e \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \theta \right) = \nabla \cdot (k_e \nabla \theta) + \dot{\Phi}_\eta + \dot{\Sigma}, \quad (6.1)$$

em que \mathbf{v} é o campo de velocidade Euleriano dentro da região, $\dot{\Phi}_\eta$ é a taxa de dissipação viscosa por unidade de volume que para um fluido equivalente incompressível é dada por, $\dot{\Phi}_\eta = 2\eta_e \mathbf{D} : \mathbf{D}$, onde η_e é a viscosidade dinâmica efetiva e $\mathbf{D} = (1/2)(\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v})$, é o tensor taxa de deformação. O primeiro termo do lado direito na equação (6.1) representa a taxa de condução de calor dentro da região. Além disso, o termo $\dot{\Sigma}$ denota a taxa de produção de energia que é a principal contribuição na descrição da hipertermia magnética. O tumor esférico de raio R_ϵ é suficientemente pequeno para que o gradiente de temperatura dentro desta região possa ser desprezado. Também, o fluxo dentro da região do tumor é muito fraco, resultando em uma descrição local ou concentrada do balanço de energia. Portanto, a condução de calor, a convecção e a dissipação viscosa apresentam um pequeno efeito em comparação com a taxa de produção de energia pelas nanopartículas. Para maiores detalhes, veja Guimarães, Cunha e Gontijo (2020). Sob essas condições, o balanço de energia térmica dado pela equação (6.1) reduz para:

$$\rho_e c_e \frac{d\theta}{dt} = \dot{\Sigma}, \quad (6.2)$$

no qual o termo do lado direito da equação (6.2) é dado por

$$\dot{\Sigma} = \dot{\mathcal{P}}_m + \dot{\mathcal{P}}_{sangue} + \dot{\mathcal{P}}_{cel}, \quad (6.3)$$

em que $\dot{\mathcal{P}}_m$ é a geração de calor produzida dentro do tumor pelas nanopartículas magnéticas submetidas ao campo alternado, $\dot{\mathcal{P}}_{sangue}$ é o calor sensível a perfusão sanguínea e $\dot{\mathcal{P}}_{cel}$ é uma geração de calor associada à atividade metabólica das células. Estas duas últimas contribuições já foram consideradas de maneira *ad hoc*, a fim de descrever o desenvolvimento temporal da temperatura no centro de um tumor (Maenosono e Saita, 2006).

Será considerado neste trabalho um modelo simples, onde a taxa de geração de energia magnética pelas nanopartículas domina a taxa de perfusão sanguínea e as gerações de calor metabólico celular. Portanto, a taxa de energia interna dentro de nossa pequena região tumoral é balanceada apenas pela geração de calor de nanopartículas magnéticas. Assim, o elemento de geração de energia magnética por unidade de volume é dado por

$$d\mathcal{P}_m = \mu_0 M_z^*(t) dH, \quad (6.4)$$

então a taxa de geração de energia magnética é expressa por

$$d\mathcal{P}_m/dt = \mu_0 M_z^*(t) dH/dt, \quad (6.5)$$

em que M_z^* é a componente z de magnetização dimensional. Especificamente, para este problema, a equação de energia local apenas indica o equilíbrio entre a taxa de energia interna por unidade de volume V_ϵ e a taxa de geração de energia magnética por unidade de volume, e pode ser expressa como:

$$\rho_e c_e \frac{d\theta}{dt} = \frac{d\mathcal{P}_m}{dt} = \mu_0 M_z^*(t) \frac{dH}{dt} = \mu_0 M_z^*(t) \omega H_0 \cos(\omega t), \quad (6.6)$$

em que $\rho_e = \rho_0(1 + \phi\Delta\rho/\rho_0)$ e $c_e = c_0(1 + \phi\Delta c/c_0)$ são a densidade efetiva e o calor específico do meio homogêneo, respectivamente. Agora, ao tomar uma média no tempo sobre a equação (6.6) resulta em:

$$\rho_e c_e \langle d\theta/dt \rangle = \mu_0 H_0 \omega \lim_{T' \rightarrow T} \frac{1}{T'} \int_0^{T'} M_z^*(t) \cos(\omega t) dt, \quad (6.7)$$

em que t , varia para um múltiplo do período de oscilação considerando $T \gg 2\pi/\omega$. Por conveniência, o limite da integral na equação (6.7) será suprimido. A taxa de temperatura escrita em termos de uma integral adimensional de $M_z(t) \cos(\omega t)$ é dada por:

$$\langle d\theta/dt \rangle = \frac{1}{\rho_e c_e} \mu_0 H_0^2 \omega \chi_s \frac{1}{T} \int_0^T M_z(t) \cos(\omega t) dt. \quad (6.8)$$

Observe que a integral adimensional na equação (6.8) é exatamente a componente imaginária da susceptibilidade complexa dada na equação (4.2). Portanto, a taxa de temperatura dentro de R_e pode ser escrita no seguinte formato compacto:

$$\langle d\theta/dt \rangle = \frac{1}{\rho_e c_e} \mu_0 H_0^2 \omega \chi''. \quad (6.9)$$

Deve ser importante notar que a função χ'' depende da frequência angular e também dos parâmetros físicos $\chi'' = \chi''(\omega; \alpha, \lambda, Pe, \phi)$. Consideremos o limite diluído, ou seja, $\phi \ll 1$ para que:

$$\rho_e c_e \sim \rho_0 c_0 (1 + \phi \beta_e). \quad (6.10)$$

Aqui β_e é definido como o parâmetro da propriedade relativa $(\Delta\rho/\rho_0 + \Delta c/c_0)$, onde $\Delta\rho = \rho_s - \rho_0$ e $\Delta c = c_s - c_0$. Quando $\phi\beta_e \ll 1$ podemos fazer a seguinte aproximação

$$\frac{1}{\rho_0 c_0 (1 + \phi \beta_e)} \sim \frac{1}{\rho_0 c_0} (1 - \phi \beta_e). \quad (6.11)$$

Agora, considerando que $\mu_0 H_0^2 = \alpha \phi k_B \theta_0 / (\chi_s v_p)$, a equação (6.9) pode ser totalmente escrita em termos de apenas quantidades adimensionais,

$$\langle d\theta/dt \rangle = \mathcal{K}_{bs} \frac{\alpha \omega}{\chi_s} \phi (1 - \phi \beta_e) \chi''(\omega; \alpha, \lambda, Pe, \phi). \quad (6.12)$$

onde $\mathcal{K}_{bs} = k_B / (\rho_0 c_0 v_p)$, pode ser interpretado como sendo um parâmetro físico que mede a importância relativa entre a energia térmica browniana e a energia de calor sensível. Além disso, a equação (6.6) em uma forma adimensionalizada poderia ser integrada numericamente para obter o histórico de temperatura antes de tomar a média de tempo. A equação diferencial de primeira ordem adimensional a ser resolvida por $\theta(t)$ seria:

$$\frac{d\theta}{dt} = \mathcal{K}_{bs} \frac{\alpha_0 \omega}{\chi_s} \phi (1 - \phi \beta_e) M_z(t) \cos(\omega t). \quad (6.13)$$

Para o cômputo de \mathcal{K}_{bs} e β_e na equação (6.12), considerou-se $v_p = 5.23 \times 10^{-25} \text{ m}^3$ para uma partícula com $d = 10 \text{ nm}$, $\rho_0 \sim 10^3 \text{ kg/m}^3$, $c_0 \sim 10^3 \text{ J/(kg.K)}$. Portanto, segue-se que $\mathcal{K}_{bs} \sim 10^{-5}$ e $\beta_e \sim 1$. Para a susceptibilidade de saturação aplicou-se o resultado da equação (4.4), expressando-a em função de ϕ e α . Dessa forma, todos os resultados foram obtidos com as seguintes quantidades adimensionais: ω , α , λ , ϕ e Pe .

6.2 Resultados sobre os efeitos Hidrodinâmicos e Dipolares no Fluido Magnético submetido a Campos Oscilatórios para aplicações na Magnetohipertermia

As figuras (6.2) e (6.3) mostram a taxa média de aumento de temperatura no tempo em função da frequência angular, ω , para várias frações volumétricas de partículas. Os resultados numéricos foram obtidos na presença e na ausência de IH, e comparados com o modelo assintótico descrito anteriormente. Nota-se uma boa concordância entre o resultado numérico sem IH, apresentado por símbolos preenchidos, e o modelo assintótico, apresentado por linha contínua. Essa comparação serve também como validação dos resultados numéricos. Como esperado, nota-se um aumento na taxa média para valores maiores de ϕ . Considerou-se nas simulações os parâmetros físicos adimensionais para $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\alpha = 1$. Observa-se em todos os resultados que $\langle d\theta/dt \rangle$ cresce até saturar-se com o aumento de ω . De acordo com os resultados apresentados nos gráficos, para baixos valores de ϕ , os resultados numéricos com IH e sem IH são indistinguíveis. Dessa forma, para baixos valores de ϕ as interações hidrodinâmicas podem ser desprezadas. As principais diferenças entre os resultados numéricos com IH e sem IH, se apresentaram para $\phi = 0.1$ e para frequências angulares no intervalo $1 < \omega < 4$. Neste intervalo temos que o tempo de resposta das partículas é da mesma ordem que o tempo característico do campo magnético aplicado ($2\pi/\omega \sim \tau_B$), favorecendo as formações de cadeias e agregados devido as interações dipolares. Em contrapartida, as interações hidrodinâmicas com característica dispersiva, reduz as formações desses aglomerados de partículas acarretando em diminuição no armazenamento de energia magnética pelas partículas com dissipação térmica menor. Para valores grandes de ω as partículas não respondem ao campo magnético aplicado ($2\pi/\omega \ll \tau_B$) resultando além de uma redução para valores próximos de zero de sua energia magnética armazenada, também acarreta uma anulação dos efeitos das interações dipolares reduzindo as formações de cadeias e agregados de partículas. Assim, para valores grandes de ω os resultados numéricos com IH e sem IH são indistinguíveis.

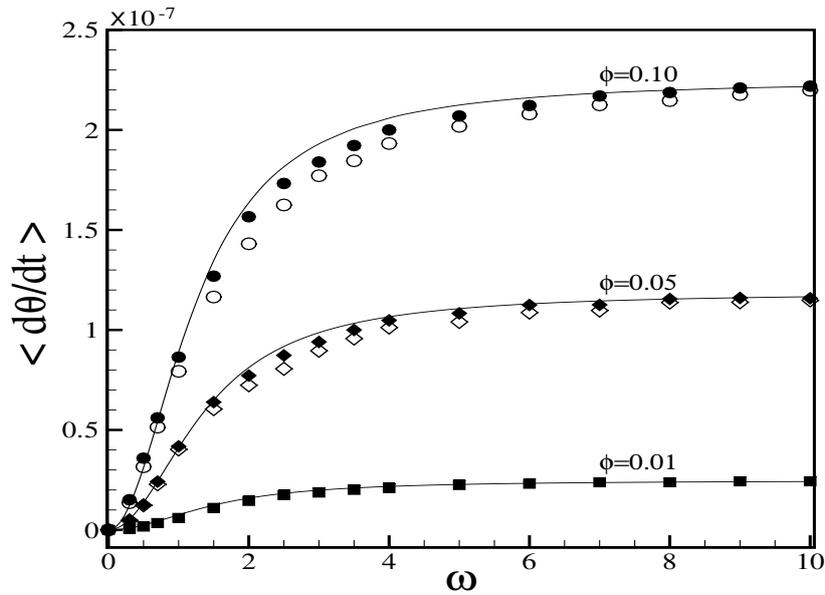


Figura 6.2: Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.

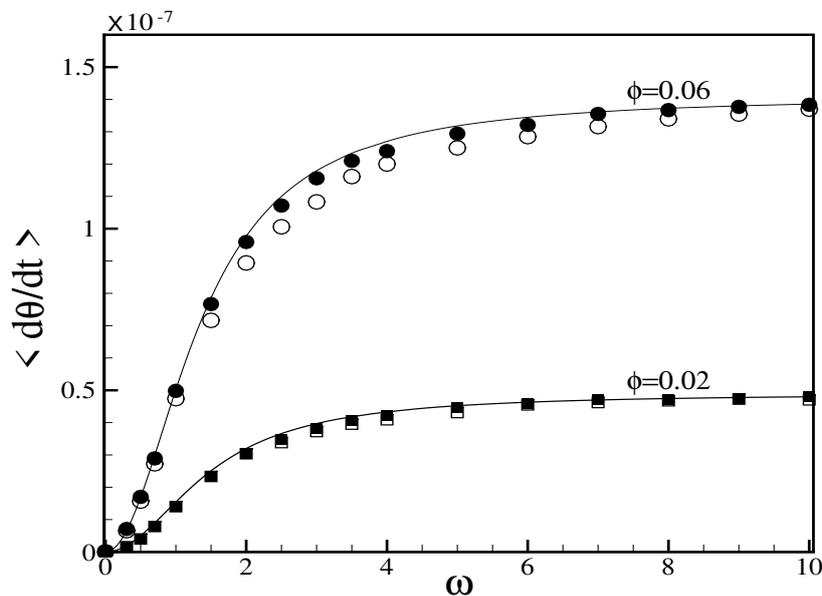


Figura 6.3: Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.

A figura (6.4) mostra a taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos e os símbolos fechados representam os resultados numéricos sem considerar IH. Nota-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos. Observa-se no gráfico que o aumento da amplitude do campo magnético oscilatório representada pelo parâmetro α , produz um aumento em $\langle d\theta/dt \rangle$. Assim, uma forma de obter uma melhora na magnetohipertermia é aumentar a amplitude do campo magnético oscilatório, isto é, elevar os valores de α . Mas esse aumento, de amplitude, tem que ser de forma controlado, pois existe um limite para frequência e amplitude de campo magnético tolerável para segurança biológica que não pode ser ultrapassado (Pankhurst et al., 2003). Com a elevação de α e valores para $\omega < 4$, o campo magnético oscilatório passa a dominar o movimento das partículas magnéticas, reduzindo o efeito da difusão browniana responsável por ocasionar desorientação nos momentos de dipolos das partículas. Dessa forma, com menos efeito browniano as partículas passam a se orientar melhor na direção do campo magnético oscilatório em cada instante de tempo, provocando um aumento de energia magnética pelas partículas e consequentemente uma perda maior dessa energia armazenada devido a inversão do sentido do campo magnético (oscilação). Para valores grandes de ω , prevalece a mesma análise feitas nas figuras (6.2) e (6.3). Como analisado nas curvas de histerese da figura (5.44), o aumento da amplitude produz um crescimento no valor do campo remanente, isto é, o ponto em que o fluido magnético apresenta uma magnetização não nula mesmo que o campo magnético aplicado seja nulo, e também um aumento do campo coercivo, campo esse definido como a quantidade necessária do campo magnético aplicado para tornar a magnetização do fluido magnético igualmente nula. Nesse processo as partículas magnéticas, ainda com energia magnética armazenadas, são forçadas pelo campo aplicado a liberar essa energia que se dissipa na forma de calor.

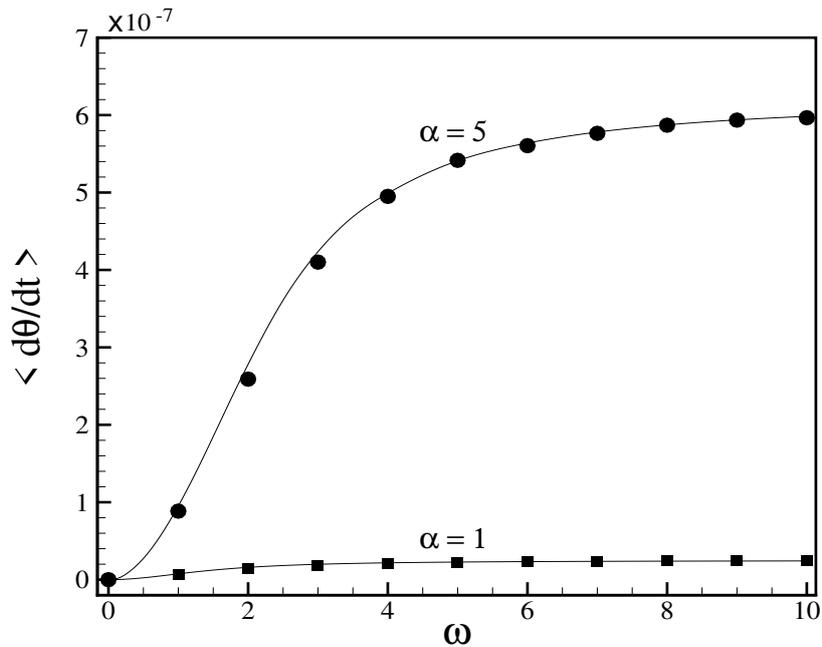


Figura 6.4: Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, os símbolos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

A figura (6.5) mostra a taxa média de aumento de temperatura no tempo em função de ϕ para $\omega \rightarrow \infty$. O resultado numérico apresentou uma boa concordância com o resultado assintótico. Foram considerados nas simulações $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\alpha = 1$ e sem interações hidrodinâmicas, pois para valores grandes de ω os resultados numéricos com e sem IH convergem para os mesmos pontos. Nota-se no gráfico um crescimento linear de $\langle d\theta/dt \rangle$ à medida que ϕ aumenta. Essa linearidade indica que os resultados da taxa média para valores grandes de ω , não sofreram efeitos de interações dipolares, caso contrário, apresentariam um comportamento de $O(\phi^2)$.

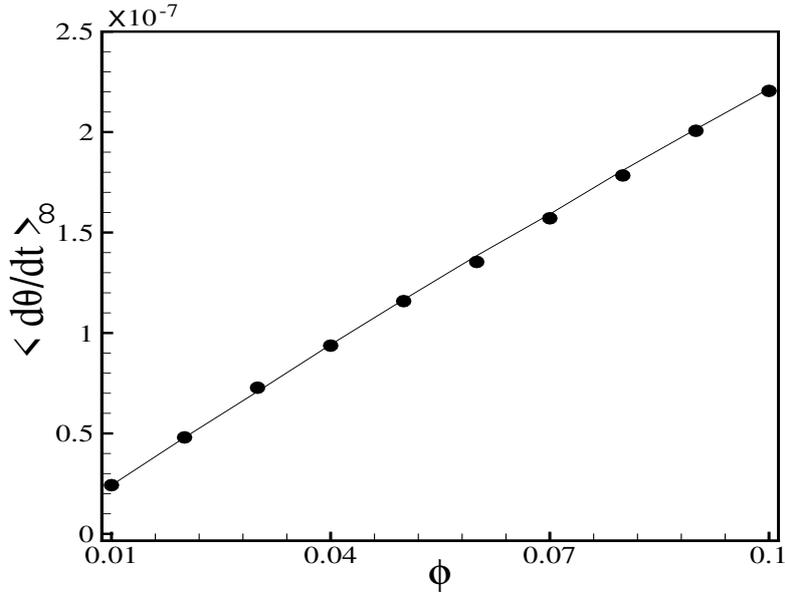


Figura 6.5: Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega \rightarrow \infty$. A linha contínua representa o resultado analítico, os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

O comportamento da taxa média de aumento de temperatura no tempo em função de ϕ é apresentado na figura (6.6) para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Com o aumento da fração volumétrica de partículas, ϕ , observa-se também um crescimento na taxa média $\langle d\theta/dt \rangle$, tanto no resultado numérico considerando IH quanto sem IH. Isso ocorre pois as partículas magnéticas são as responsáveis pela dissipação de energia magnética na forma de calor, assim, com o aumento de ϕ , conseqüentemente está aumentando a quantidade de partículas magnéticas no fluido. Além disso, os efeitos das interações dipolares se intensificam, por ter mais partículas próximas umas das outras, favorecendo o aparecimento de cadeias e agregados, acentuando a sua capacidade de armazenamento de energia magnética e como consequência disso, uma maior dissipação de energia na forma de calor por histerese magnética. O gráfico apresenta os resultados numéricos para $5 \leq \phi \leq 15$, e mostra uma diferença entre os resultados obtidos com IH e sem IH. Observa-se também um comportamento linear $O(\phi)$ apenas para valores mais baixos de ϕ . Para $\phi > 0.1$, a influência de termos de ordem superior como $O(\phi^2)$ é notável no gráfico. Esse comportamento não linear está intimamente relacionado ao efeito mais forte das interações dipolares magnéticas entre as partículas à medida que ϕ é aumentado. Deve-se notar que à medida que a concentração

de partículas aumenta, espera-se que o agrupamento em pequena escala cresça produzindo uma falta de homogeneidade macroscópica na suspensão magnética. Portanto, enquanto as interações dipolares tendem a acelerar esse processo, as interações hidrodinâmicas com sua característica dispersiva, inibem o mesmo e podem diminuir levemente a taxa média de temperatura gerada pelo aquecimento magnético em frações voluméticas de partículas mais altas. No entanto, o efeito das interações hidrodinâmicas das partículas não é importante em concentrações mais baixas (por exemplo $\phi \leq 0,05$) e ambas as curvas se tornam indistinguíveis. Nestes regimes de baixos ϕ , as partículas se apresentam mais isoladas umas das outras, inibindo as formações de aglomerados de partículas.

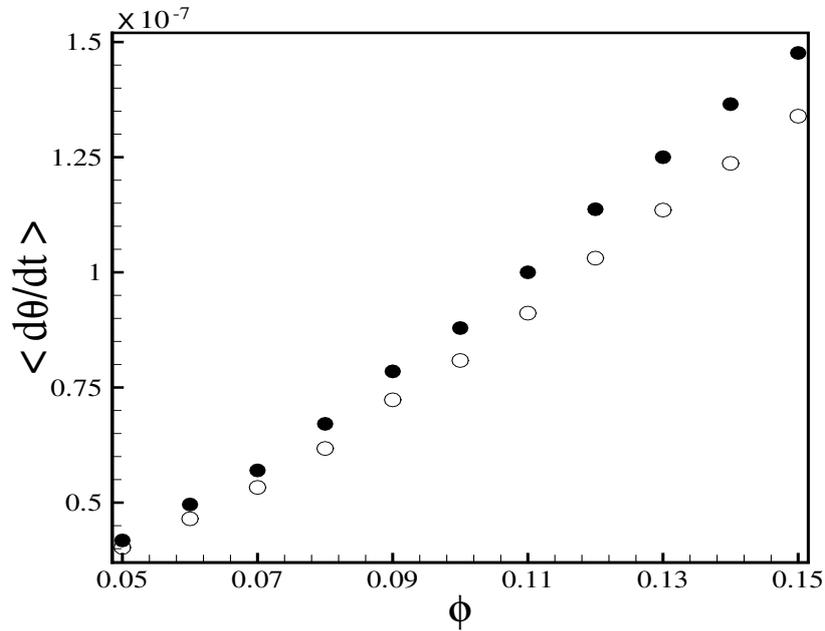


Figura 6.6: Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE na presença de IH.

A influência das interações dipolares na taxa média de aumento de temperatura é apresentada na figura (6.7). Foi realizada uma comparação nos resultados numéricos com IH e sem IH. As simulações foram realizadas para $\phi = 0,1$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Esse resultado deixa mais evidente, como o aumento das interações dipolares melhoram a dissipação de energia magnética na forma de calor. Com o aumento de λ as partículas se aproximam umas

das outras resultando em mais formações de cadeias e agregados. É importante destacar que esse comportamento apresentado verificou-se para $\omega = 1$. Já para valores maiores de ω , o tempo característico do campo aplicado torna-se muito pequeno com relação ao tempo de resposta das partículas, reduzindo drasticamente a sua capacidade de armazenamento de energia magnética e conseqüentemente anulando o efeito das interações dipolares como foi mostrado por meio da parte imaginária da susceptibilidade complexa da figura (5.31). Na figura (6.7) nota-se que o resultado sem IH, se desvia dos resultados com IH tornando-se maiores, à medida que as interações dipolares aumentam. De fato, as simulações para λ maiores sempre apresenta uma estrutura não homogênea e o aparecimento de estruturas anisotrópicas na suspensão aumenta χ'' como mostra a figura (5.30) e, conseqüentemente, melhora a produção de aquecimento por dissipação de energia magnética. Nota-se que o efeito das interações hidrodinâmicas viscosas é mais evidente na presença de heterogeneidade da suspensão, pois as partículas formam estruturas heterogêneas, como cadeias longas, com valores maiores de λ . Assim, as flutuações de velocidade produzidas por interações hidrodinâmicas tendem a espalhar os agregados de partículas, evitando a formação de estruturas. Os resultados numéricos das simulações indicam que as interações hidrodinâmicas enfraquecem o efeito favorável das interações dipolares na produção de aquecimento por histerese magnética em suspensões heterogêneas. Para valores pequenos de λ , a distribuição de partículas é quase homogênea e isotrópica levando a resultados indistinguíveis, mesmo quando se contabiliza o efeito das interações hidrodinâmicas.

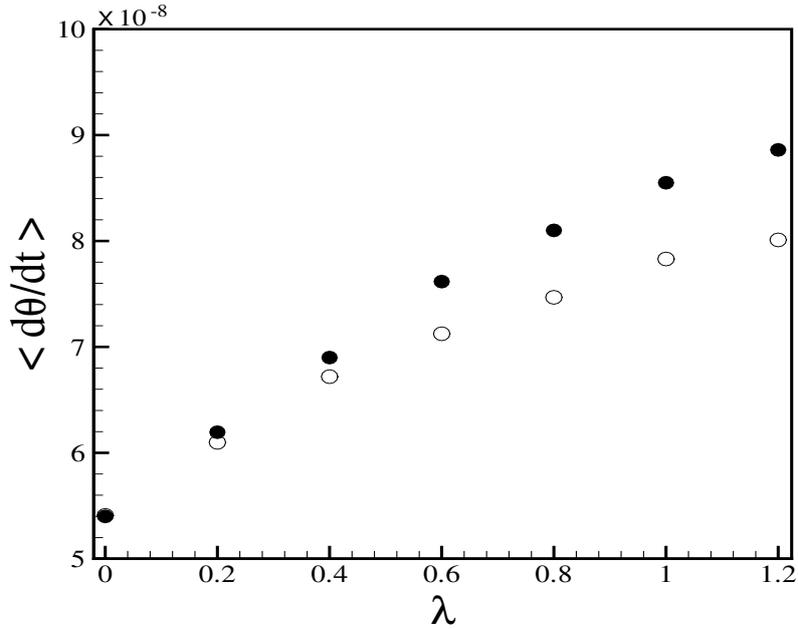


Figura 6.7: Taxa média de aumento de temperatura em função de λ para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH.

A comparação como forma de validação entre o resultado analítico e o resultado numérico da taxa média de aumento de temperatura no tempo em função do parâmetro α é apresentada na figura (6.8) mostrando-se uma boa concordância. O resultado analítico está representado por linha contínua e o resultado numérico por quadrados vazios. Os resultados foram obtidos para $\phi = 0.01$, $\omega = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$ sem considerar IH. Esse comportamento quadrático já é esperado pela própria definição da taxa média de aumento de temperatura dimensional apresentada na equação (6.8) em que aparece a amplitude H_0 ao quadrado. Fisicamente como analisado na figura (6.4) a intensificação do campo magnético aplicado por meio de α acarreta a redução dos efeitos brownianos sobre as partículas magnéticas ocasionando uma melhora em sua orientação com o campo aplicado. Assim, como a magnetização é uma média da projeção dos momentos de dipolos na direção do campo aplicado, a norma da resultante vai crescendo, pois o campo magnético passa a dominar o movimento das partículas. Como resultado do armazenamento elevado de energia magnética, obtém-se uma maior dissipação térmica. Nas próximas figuras sobre $\langle d\theta/dt \rangle$ em função de α não houve uma comparação com a teoria assintótica, visto que, o modelo analítico é restrito

para $Pe \leq 1$. A figura (6.9) mostra a taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$ e três valores de números de Péclet. Os resultados numéricos foram obtidos sem considerar interações hidrodinâmicas, pois em regimes de baixa fração volumétrica de partículas, como este caso, as partículas estão praticamente isoladas. Dessa forma, as perturbações causadas pelas interações hidrodinâmicas podem ser desprezadas. Outros parâmetros utilizados nas simulações, foram $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Observa-se um comportamento quadrático $\langle d\theta/dt \rangle$ com o crescimento de α . Nota-se que esse comportamento se apresenta para os três valores de Pe simulados. Os resultados numéricos considerando $Pe = 1.5$ e $Pe = 2$, vão se aproximando, à medida que α aumenta. Como já observado no resultado (5.32) do capítulo 5 sobre χ'' , o tempo característico do campo magnético reduz com relação ao tempo de resposta das partículas. Assim, mesmo aumentado o valor de Pe , devido ao crescimento de α os resultados se aproximam, pois o campo magnético aplicado torna-se dominante com relação aos outros mecanismos físicos representado por outros parâmetros. À medida que Pe se torna maior, os valores de $\langle d\theta/dt \rangle$ se aproximam no intervalo $0 \leq \alpha < 4$ e se afastam com valores invertidos para $\alpha > 4$, como indica o gráfico da figura (6.10). Portanto, para altos valores de α e Pe os resultados se invertem, apresentando uma $\langle d\theta/dt \rangle$ mais elevada para Pe menores. Esse resultado mostra, que a partir de um diâmetro as partículas dissipam menos energia térmica à medida que a amplitude do campo oscilatório cresce. De fato, para partículas muito grande, mesmo com os momentos dipolares maiores, o seu tempo de resposta ao campo magnético reduz, devido ao crescimento do tempo de relaxação magnética, observando que $\tau_B \sim d^3$.

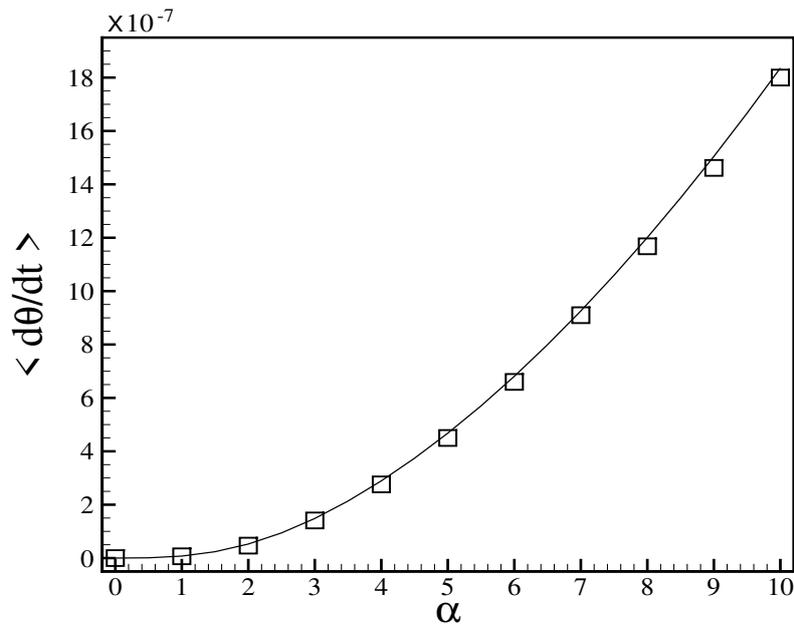


Figura 6.8: Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$ e $Pe = 1$. Resultado numérico com SE e sem IH com quadrados abertos e resultado analítico representado por linha contínua.

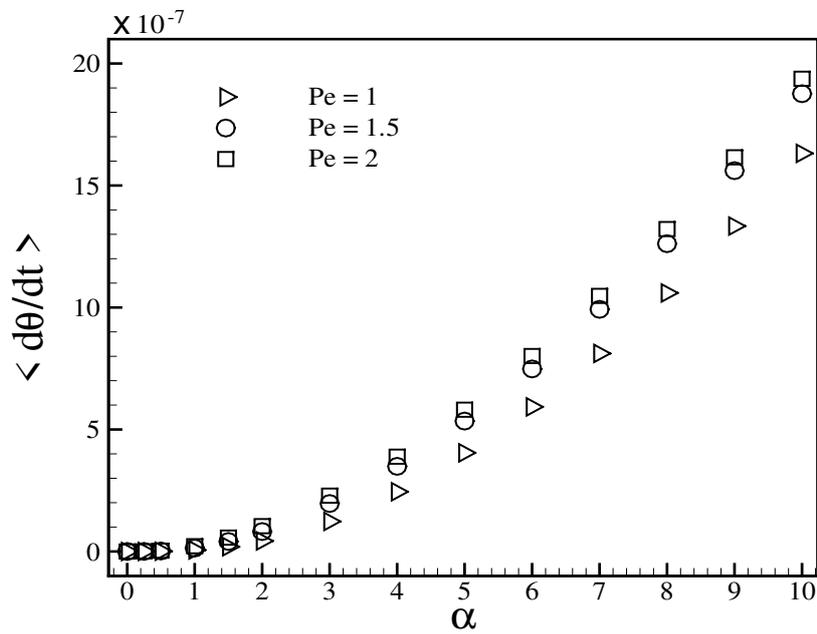


Figura 6.9: Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam o resultados numéricos com SE e sem IH para $Pe = 1$, $Pe = 1.5$ e $Pe = 2$.

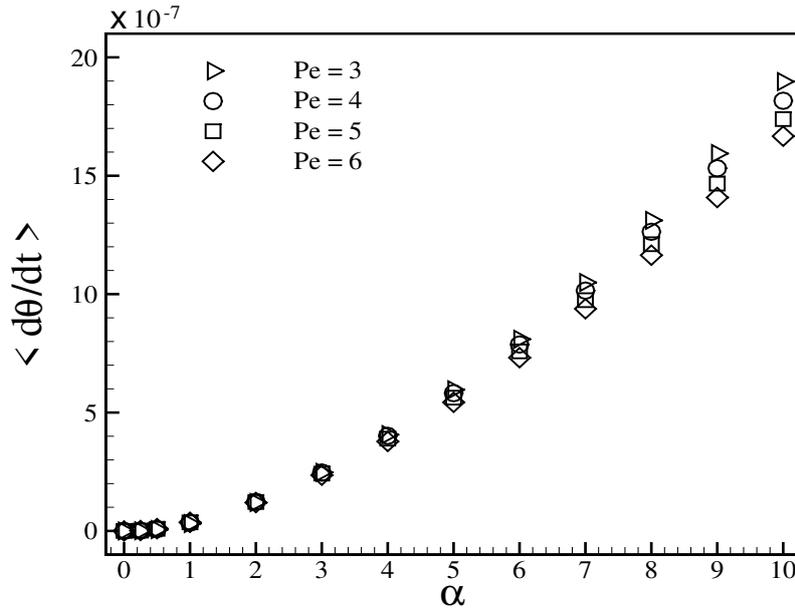


Figura 6.10: Taxa média de aumento de temperatura em função de α para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os símbolos abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $Pe = 3$, $Pe = 4$, $Pe = 5$ e $Pe = 6$.

O aumento de temperatura em função de t é apresentado nas figuras (6.11), (6.12) e (6.13), para $\phi = 0.1$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1$ e $\omega = 1$. Esses resultados foram obtidos por meio da integração direta de $d\theta/dt$ exposta na equação (6.13). Na figura (6.11), observa-se uma boa concordância entre o resultado numérico sem IH, representado com linha traço-ponto, e o resultado analítico representado por uma linha contínua. À medida que o tempo aumenta a temperatura cresce. Nota-se também em todos os gráficos uma diferença entre os resultados numéricos com IH, representados por linha pontilhada, em comparação com os resultados numéricos sem IH. Essa diferença é maior para $Pe = 1$ e vai reduzindo com o aumento de Pe . Como já analisado em outros gráficos, para Pe maiores, o campo magnético passa a dominar o movimento das partículas reduzindo os efeitos das interações hidrodinâmicas, assim, a diferença entre os resultados numéricos apresentados nestes gráficos vão decrescendo com o aumento de Pe , como é mostrado na figura (6.12) e (6.13).

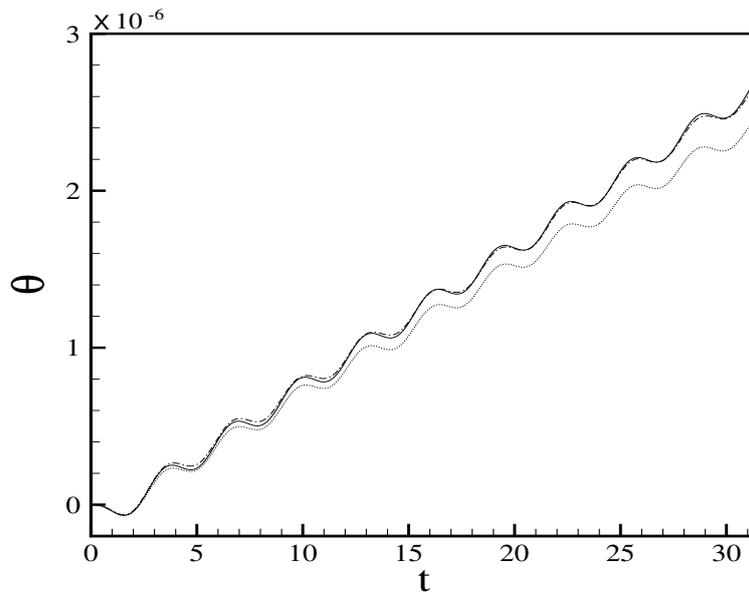


Figura 6.11: Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico, a linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.

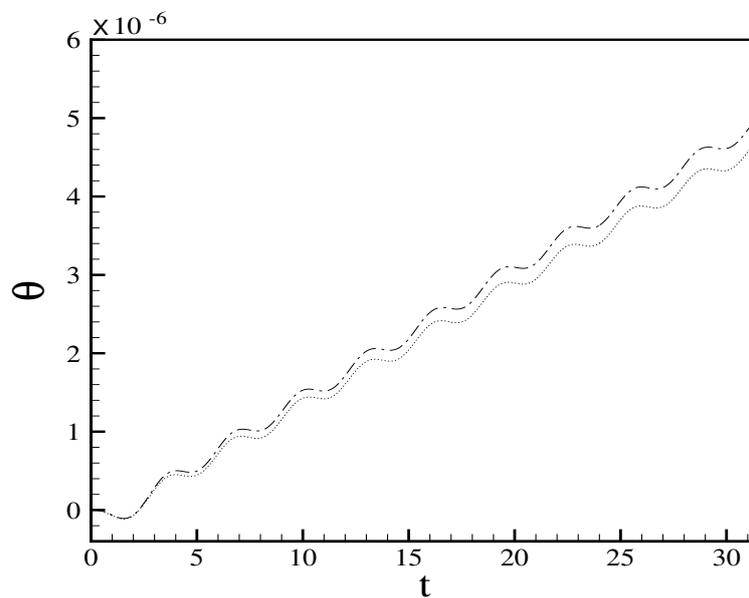


Figura 6.12: Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 1.5$ e $\omega = 1$. A linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.

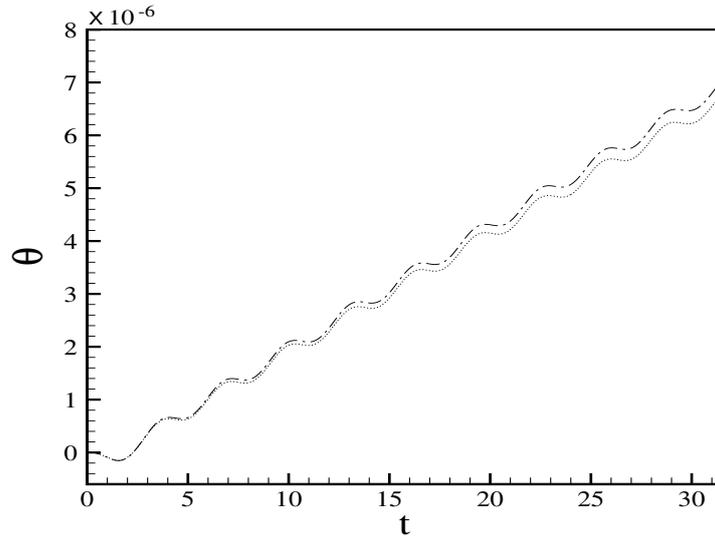


Figura 6.13: Aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 2.0$ e $\omega = 1$. A linha traço ponto representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha pontilhada representa o resultado numérico com SE e IH.

A figura (6.14) mostra a taxa de aumento de temperatura em função de t para $\phi = 0.1$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. O resultado numérico sem IH é representado pela linha contínua e o resultado numérico com IH é representado pela linha tracejada. Esse resultado foi obtido após a derivação de θ com relação ao tempo referente a figura (6.11).

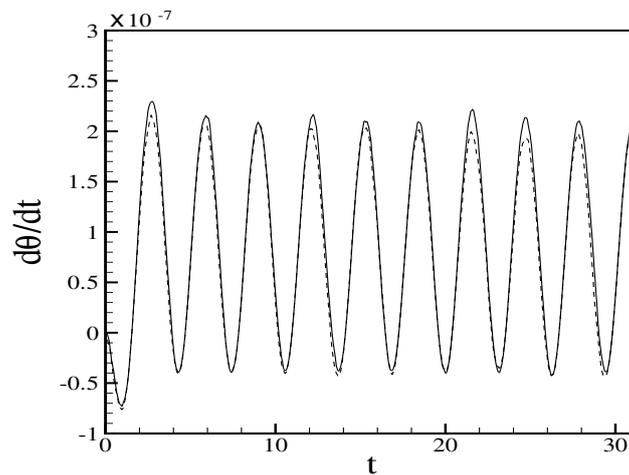


Figura 6.14: Taxa de aumento de temperatura em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. A linha contínua representa o resultado numérico com SE e sem IH e a linha tracejada representa o resultado numérico com SE e IH.

O aumento da temperatura média em função do tempo é apresentado nas figuras (6.15), (6.16) e (6.17). Na figura (6.15) os resultados foram obtidos para $\phi = 0.01$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 1$ e dois valores de Pe . Nota-se neste gráfico para $Pe = 1$, a temperatura média para aplicação da hipertermia magnética leva-se aproximadamente 2.5 vezes mais tempo para atingir o intervalo $[42^\circ C, 48^\circ C]$ em comparação que $Pe = 1.5$. Esse comportamento foi explicado anteriormente nos resultados para $\langle d\theta/dt \rangle$, em que ao aumentarmos o valor de Pe , obtém-se uma redução dos efeitos brownianos, intensificando o efeito do campo magnético oscilatório aplicado, resultando na elevação de $\langle d\theta/dt \rangle$. Para essa fração volumétrica de partículas os efeitos das interações hidrodinâmicas são desprezados. Dessa forma, com um pequeno aumento do número de Péclet ($Pe = 1.5$), a temperatura inicial para magnetohipertermia é atingida bem mais rapidamente. Isso é importante visto que os seres humanos tem um limite para aplicação do procedimento terapêutico devido a efeitos indesejáveis no sistema biológico, com aplicações de altas frequências e amplitudes de campos magnéticos (Pankhurst et al., 2003). No encarte da figura (6.15) é apresentado o resultado para valores dimensionais de temperatura e tempo. Para o cômputo foi considerado os mesmos parâmetros da figura, com $Pe = 1$. Considerou-se também uma partícula magnética com diâmetro $d \approx 10$ nm e volume $v_p \approx 5.23 \times 10^{-25}$ m³. Para o cômputo da densidade e calor específico do meio e do material, foi considerado os valores da água e magnetita. Portanto, tem-se para água, $\rho_0 = 993.37$ kg/m³, $c_0 = 4.18 \times 10^3$ J/kg.K e $\rho_s = 5.180$ kg/m³, $c_s = 670$ J/kg.K para magnetita. Tem-se também $\theta_0 = 310.15$ K, $\omega = 100$ kHz e $H_0 = 14.61$ kAm⁻¹. A temperatura foi examinada no intervalo $36^\circ C < \langle \theta \rangle < 48^\circ C$. O tempo para o início terapêutico da magnetohipertermia de $42^\circ C$ é alcançado em cerca de 45 s. Para aplicação de magnetohipertermia, a temperatura no intervalo de $42^\circ C - 48^\circ C$ tem que ser mantida preferencialmente por no mínimo 30 minutos para as células cancerígenas morrerem por termo-apoptose (Moroz et al., 2002). Acima deste intervalo, ocorrem as mortes das células cancerígenas por termo-necrose, que além, de causar efeitos indesejáveis, como por exemplo, a lise celular, espalhando seu conteúdo nas células vizinhas, acarretando uma resposta inflamatória. Também, as células saudáveis são afetadas pelo mesmo processo de termo-necrose.

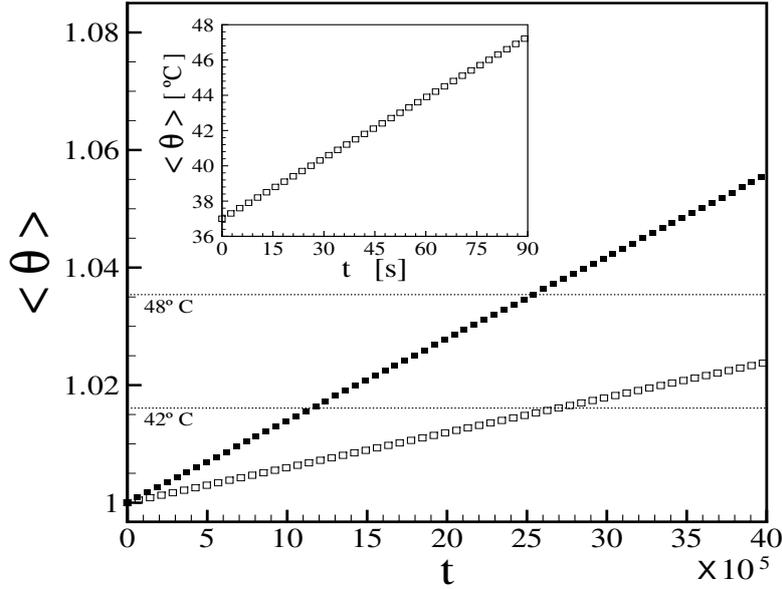


Figura 6.15: Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.5$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.0$.

A figura (6.16) mostra os resultados para $\omega = 1$ e $\omega = 3$. Nota-se um aumento da temperatura para $\omega = 3$ bem mais rápido do que para $\omega = 1$. De fato, foi visto anteriormente que o aumento de ω provoca um crescimento em $\langle d\theta/dt \rangle$. Porém, o valor de ω não pode ser muito grande, pois entraria no cômputo de $\langle d\theta/dt \rangle$ outros fatores indesejáveis, diferentes da dissipação térmica por histerese magnética (Kappiyoor et al., 2010). A figura (6.17) mostra a aproximação linear do aumento médio de temperatura para $\phi = 0.01$ e $\phi = 0.1$, ambos os casos com $\omega = 1$. Para $\phi = 0.1$ o resultado numérico sem IH foi comparado com o resultado considerando IH. Nota-se que no intervalo de aplicação da magnetohipertermia não apresentou-se diferença significativa nos resultados com e sem IH. A diferença foi maior para valores de tempos fora do intervalo de segurança para células saudáveis, não sendo possível a aplicação da terapia. Agora, ao comparar os resultados para os dois valores de ϕ , observa-se que a temperatura segura para aplicação da magnetohipertermia é obtida mais rapidamente para ϕ maiores. Porém, devida a injeção de corpos estranho e com uma certa toxicidade no corpo humano, como as partículas magnéticas, o ideal é que a temperatura no intervalo de segurança seja obtida com uma menor fração volumétrica de partículas.

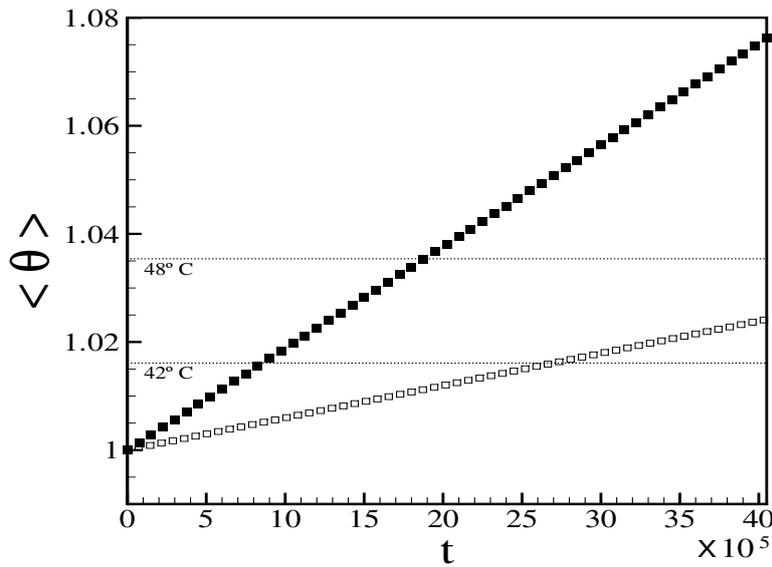


Figura 6.16: Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $Pe = 1$. Os quadrados fechados representam os resultados numéricos com SE para $\omega = 3$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE para $\omega = 1$.

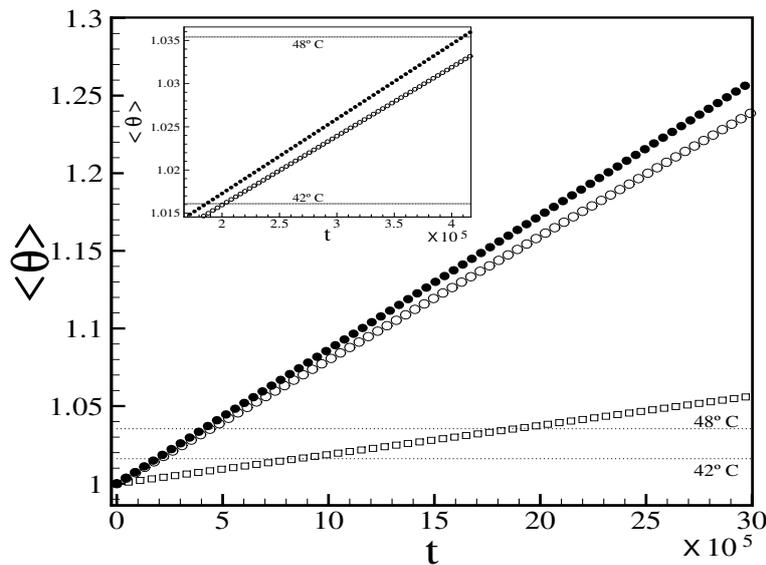


Figura 6.17: Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, e $Pe = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $\phi = 0.1$ e $\omega = 1$, os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE e IH para $\phi = 0.1$ e $\omega = 1$ e os quadrados abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH para $\phi = 0.01$ e $\omega = 3$.

O aumento da temperatura média em função de ϕ é apresentado na figura (6.18) para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os resultados numéricos foram comparados, considerando $Pe = 1$ e $Pe = 1.5$. Devido a relativamente baixa fração volumétrica de partículas ϕ , as simulações foram realizadas sem interações hidrodinâmicas. Além disso, foi fixado para todos os resultados o tempo adimensional de $t = 35 \times 10^5$. O intervalo $[42^\circ\text{C}, 48^\circ\text{C}]$, indica a temperatura ideal para a hipertermia magnética. Neste intervalo é provocada a destruição

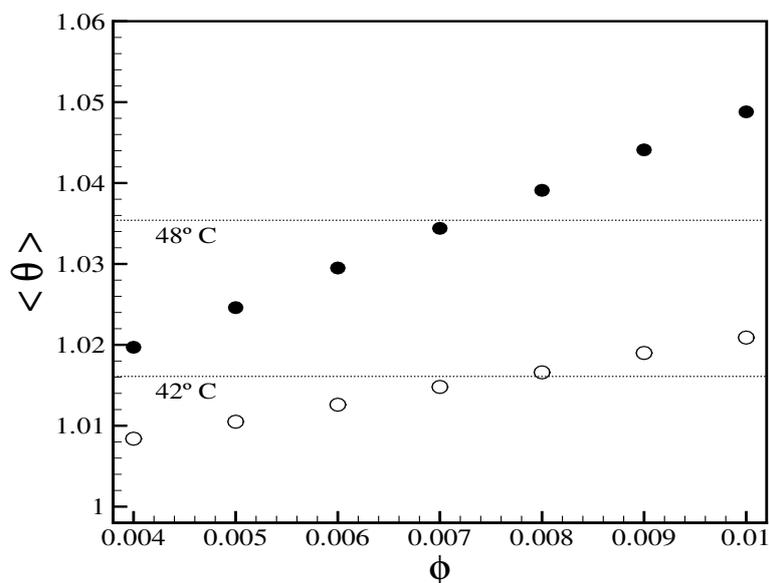


Figura 6.18: Aumento da temperatura média em função de ϕ para o tempo adimensional de $t = 35 \times 10^5$ com $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.5$ e os círculos abertos representam os resultados numéricos com SE para $Pe = 1.0$.

das células cancerígenas, sendo mais sensíveis à temperatura que as células saudáveis. Acima de 48°C , as células saudáveis também começam a ser afetadas pela temperatura provocando a sua destruição. Portanto, para aplicação em magnetohipertermia é importante manter-se neste intervalo de temperatura. E para isso, é crucial o conhecimento e controle dos parâmetros físicos que afetam a temperatura. Nota-se para $Pe = 1$, representado por círculos vazios, um aumento da temperatura média à medida que ϕ cresce. A temperatura de 42°C é atingida para $0.008 \leq \phi \leq 0.01$ para o tempo adimensional de $t = 35 \times 10^5$. Observa-se que para ϕ mais baixos também atingirão o intervalo para magnetohipertermia, ao considerar um tempo maior de aplicação. Já para $Pe = 1.5$, ao considerar esse tempo

adimensional, a temperatura inicial para aplicação de magnetohipertermia é alcançada para valores de ϕ menores. Essa otimização para Pe maior, parece estar associada com a redução dos efeitos brownianos sobre a partícula.

6.3 Resultados para Taxa de Aumento de Temperatura na Magnetohipertermia considerando um novo campo magnético.

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos para taxa média de aumento de temperatura em função do tempo, tendo em vista o seguinte campo magnético, dado por

$$\mathbf{H} = H_0 \hat{\mathbf{e}}_z (1.061) (\sin(\omega t) + (1/3) \sin(3\omega t)). \quad (6.14)$$

Esse campo não senoidal será denotado nos resultados simplesmente por campo mag2, e o campo magnético oscilatório $\mathbf{H} = H_0 \hat{\mathbf{e}}_z \sin(\omega t)$ por campo mag1. A figura (6.19) apresenta o comportamento do campo mag2 em comparação com o campo mag1, sendo este aplicado em todas as simulações referentes aos resultados das seções anteriores.

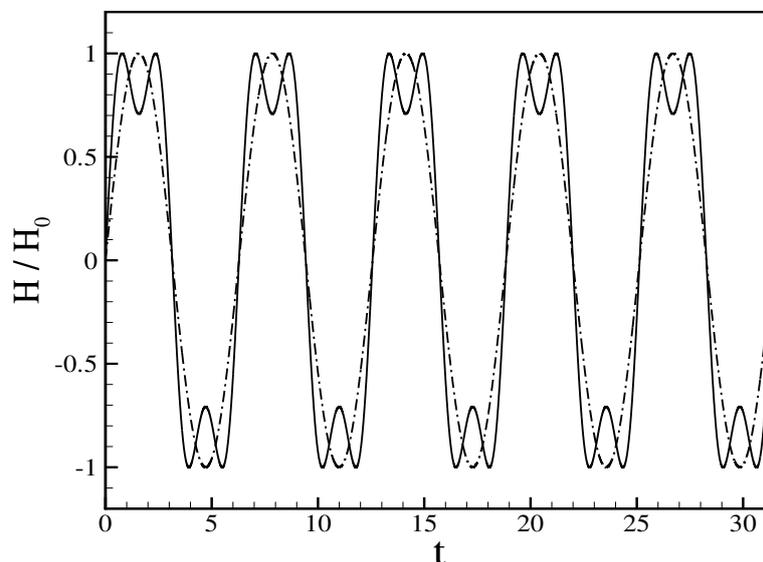


Figura 6.19: Campo mag1 em função do tempo, representado por traço-ponto e campo mag2 representado por linha contínua.

A taxa média de aumento de temperatura denotada por, $\langle d\theta/dt \rangle$, obtida por meio dos resultados considerando o campo mag2, foi adimensionalizada de forma análoga definida na equação (6.8) e (6.12), resultando na seguinte forma, dada por

$$\langle d\theta/dt \rangle = \mathcal{K}_{bs}\alpha\omega\phi(1 - \phi\beta_e) (1.061)\frac{1}{T} \int_0^T M_z(t)[\cos(\omega t) + \cos(3\omega t)]dt. \quad (6.15)$$

As comparações dos resultados para $\langle d\theta/dt \rangle$ em função de ω considerando os campos, mag1 e mag2, são apresentados nas figuras (6.20), (6.21), (6.22), (6.23), (6.24) e (6.25). Os valores numéricos foram obtidos por meio de simulações com os mesmos parâmetros físicos. Observa-se em todos os resultados um aumento em $\langle d\theta/dt \rangle$ para o campo mag2. Dessa forma, esse resultado mostra que o efeito de hipertermia magnética pode ser melhorado de acordo com o campo magnético aplicado, mantendo-se os mesmos parâmetros físicos. Todos os resultados assintóticos e numéricos apresentados para o campo mag1 foram analisados e discutidos nas seções anteriores. Nota-se que os resultados para o campo mag2 apresentam o mesmo comportamento em comparação com o campo mag1, diferenciando-se apenas com o crescimento de $\langle d\theta/dt \rangle$ apresentando maiores valores. Assim, a análise física do comportamento é análoga aos resultados apresentados e discutidos para o campo mag1. Esses resultados mostram que é possível obter um melhoramento no efeito de magnetohipertermia por meio de um outro campo mag2. Dessa forma, o movimento não senoidal induzido pelo campo magnético aplicado, implicará numa maior dificuldade pela partícula em seguir o comportamento em fase com campo magnético. Em consequência disso, terá uma componente fora de fase maior implicando num crescimento da dissipação de energia magnética na forma de calor, em comparação com um campo mag1.

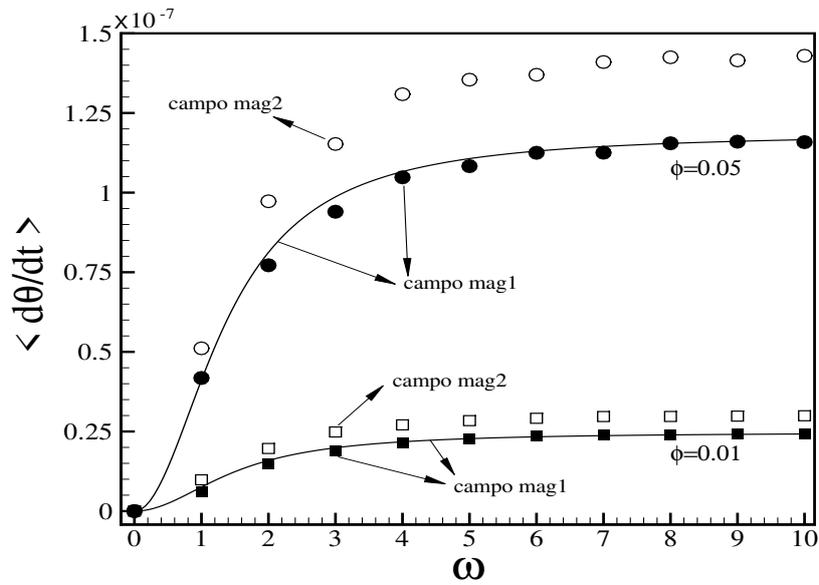


Figura 6.20: Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$ e $Pe = 1$. As linhas contínuas representam os resultados analíticos, símbolos fechados e abertos representam os numéricos com SE, sem IH.

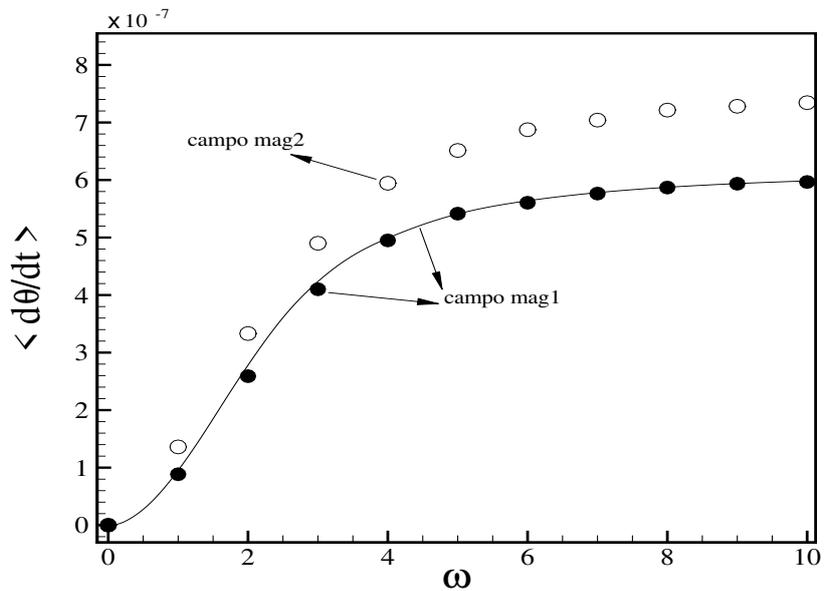


Figura 6.21: Taxa média de aumento de temperatura em função de ω para $\alpha = 5$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $Pe = 1$. A linha contínua representa o resultado analítico, símbolos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE, sem IH.

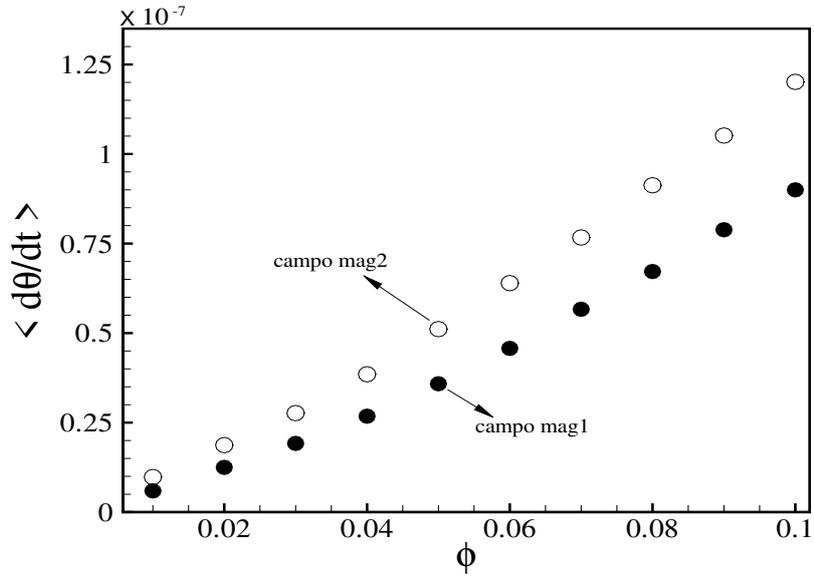


Figura 6.22: Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Os círculos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

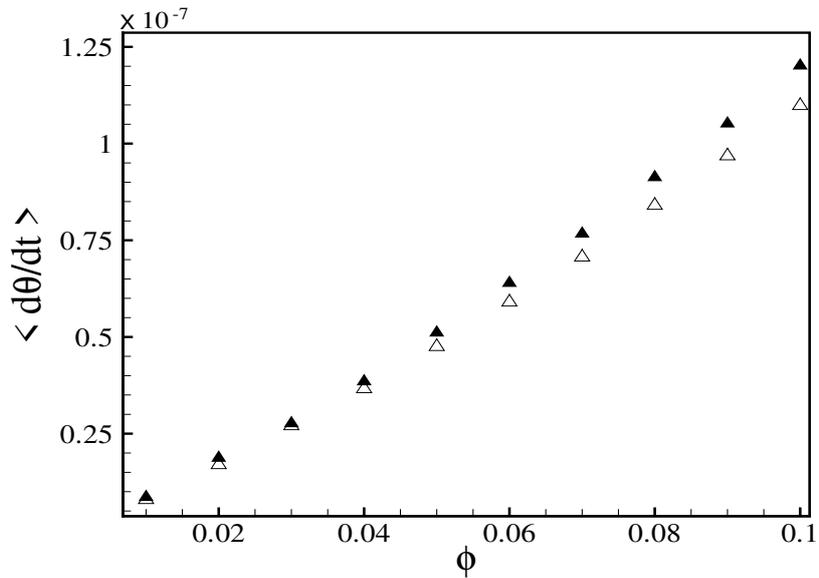


Figura 6.23: Taxa média de aumento de temperatura em função de ϕ para $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$, considerando somente o campo mag2. Símbolos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

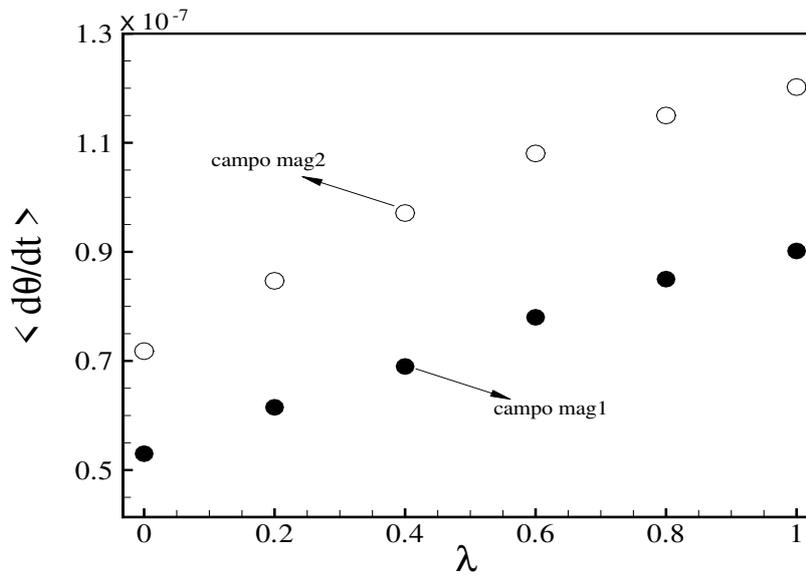


Figura 6.24: Taxa média de aumento de temperatura em função de λ para $\phi = 0.10$, $\alpha = 1$, $Pe = 1$ e $\omega = 1$. Círculos fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE e sem IH.

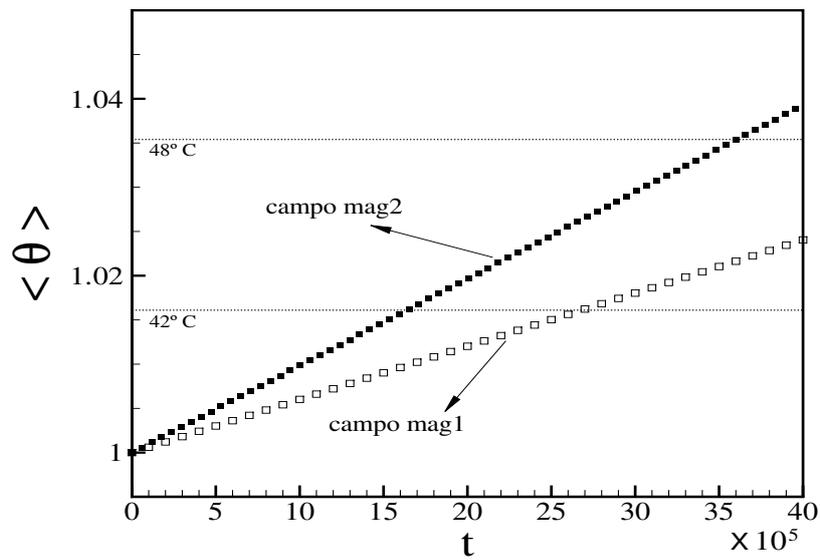


Figura 6.25: Aumento da temperatura média em função de t para $\alpha = 1$, $Pe = 1$, $\lambda = 1$, $\phi = 0.01$ e $\omega = 1$. Quadrados fechados e abertos representam os resultados numéricos com SE sem IH.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

7.1 Conclusões

Neste trabalho investigou-se, através de simulações computacionais diretas de partículas utilizando o método de Dinâmica de Langevin, a influência das interações hidrodinâmicas de longo alcance e interações dipolares entre partículas magnéticas, no comportamento dos módulos real (χ') e imaginário (χ'') da susceptibilidade complexa do fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório. A parte imaginária χ'' , relacionada com a dissipação de energia magnética na forma de calor, é usada para investigar o processo de magnetohipertermia. Em todas as simulações realizadas para o modelo de "dipolo fixo", em que o momento magnético gira com a própria partícula, considerou-se um domínio com condições de contorno periódicas evitando problemas de paredes devido a finitude do sistema.

O método das somas de Ewald foi aplicado para o cômputo de interações dipolares entre partículas magnéticas, especificamente para torque magnético com decaimento de $1/r^3$, e também para o cômputo das interações hidrodinâmicas com decaimento de $1/r$, solucionando o problema de divergência gerado pelo lento decaimento das interações. A

vantagem deste método é de uma convergência mais rápida em comparação com a soma direta, apresentando-se uma alta precisão e velocidade razoável ao computar interações de longo alcance em sistemas periódicos. Porém para o cálculo das forças magnéticas com decaimento de $1/r^4$ não houve necessidade de aplicação do método das somas de Ewald, utilizando-se o método de Mínima Imagem, calculando as interações magnéticas sem a contribuição da periodicidade das imagens das partículas, produzindo resultados com uma boa precisão.

Uma análise, do comportamento da susceptibilidade complexa do fluido magnético, foi realizada considerando somente interações dipolares para três diferentes frações volumétricas de partículas. Observou-se um deslocamento no "pico" para frequências angulares mais baixas com o crescimento da fração volumétrica de partículas, indicando uma mudança em seu tempo de relaxação magnética, provocada pelo aumento das interações dipolares e conseqüentemente pelo aumento de aglomerados de partículas como cadeias e agregados. Em todos os resultados para a susceptibilidade complexa observou-se para valores maiores de ω uma redução nos valores, tanto na parte real quanto na parte imaginária. De fato, à medida que ω cresce, ocasiona uma redução no tempo característico do campo magnético oscilatório com relação as partículas. Isso leva as partículas a não responderem, efetivamente ao campo magnético aplicado, provocando uma redução na magnetização e como resultado uma anulação dos efeitos das interações dipolares entre as partículas. Os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância em comparação com os resultados analíticos considerando $Pe = 1$.

Os resultados com Mínima Imagem mostraram uma boa precisão para sistema diluídos. Assim, para baixa fração volumétrica os dois métodos apresentaram valores aproximados. Porém, com o aumento de ϕ , elevaram-se as diferenças entre os valores numéricos para $0 < \omega < 3$. Como previsto, o método MI produz bons resultados somente para as suspensões magnéticas diluídas, nos quais, os efeitos das interações dipolares podem ser desprezados. Esse resultado serve também para mostrar os efeitos das interações dipolares no comportamento da susceptibilidade complexa. O aumento de ϕ provoca uma intensificação nas formações de cadeias e agregados de partículas ocasionando um aumento tanto na parte real quanto na parte imaginária da susceptibilidade complexa. Essa diferença entre os valores numéricos volta a diminuir com o aumento de ω . Como descrito anteriormente para ω

grandes as interações dipolares entre as partículas podem ser desprezadas, não apresentando diferença entre os dois métodos.

Posteriormente foi analisado o comportamento da susceptibilidade complexa considerando interações dipolares e hidrodinâmicas. Para valores mais altos de ϕ notou-se uma diferença considerável entre os valores numéricos simulados com IH e sem IH. A medida que a concentração de partículas aumenta, o efeito agregativo das interações dipolares leva a uma maior formação anisotrópica de cadeias e agregados de partículas, provocando um aumento nos módulos da susceptibilidade complexa. Em contra partida, o efeito dispersivo, das interações hidrodinâmicas viscosas, tendem a manter a suspensão mais isotrópica e homogênea devido a quebra dessas cadeias e agregados de partículas. Isso leva a uma redução tanto da parte real quanto da parte imaginária para frequências angulares na faixa $0 < \omega < 3$. Para ω maiores, como discutido anteriormente, as partículas não respondem efetivamente ao campo magnético oscilatório, que além de provocar uma anulação das interações dipolares também provoca uma anulação dos efeitos das interações hidrodinâmicas, e assim, os resultados numéricos convergem para os mesmos valores. Para baixos valores de ϕ , as simulações levaram a resultados numéricos praticamente indistinguíveis. Nestes regimes diluídos tanto os efeitos das interações dipolares quanto os efeitos das interação hidrodinâmicas viscosas podem ser desprezados, pois as partículas se apresentam aproximadamente isoladas.

Destaca-se também, a indentificação do número de Péclet como um parâmetro físico relevante correspondente ao tempo de relaxação adimensional da partícula. Constatamos que o efeito das interações hidrodinâmicas pode ser percebido, principalmente, para valores menores do número de Péclet, apresentando-se mais sensível para capturar esse efeito. Porém, para valores mais altos de Péclet, a influência do campo magnético domina as interações hidrodinâmicas de longo alcance e dificulta a observação direta desse mecanismo. Observou-se também, que o número de Péclet parece ter uma grande influência nas partes reais e imaginárias da susceptibilidade complexa. Como a parte imaginária da susceptibilidade complexa está associada à dissipação de calor, notamos que a relaxação do tempo das partículas apresenta ser um importante parâmetro controlável para otimizar a eficiência das técnicas de magnetohipertermia.

Para estudos em magnetohipertermia, foi observado que à medida que a concentração de

partículas aumenta, dois mecanismos concorrentes influenciam a produção de aquecimento por dissipação de energia magnética por histerese. As interações dipolares, com característica agregativa, leva em sistemas mais densos à formação de estruturas anisotrópicas em cadeias e agregados de partículas, enquanto as interações hidrodinâmicas viscosas com característica dispersivas, reduz as formações desses aglomerados de partículas, tendendo a manter a suspensão magnética mais homogênea e isotrópica, provocando uma diminuição no armazenamento de energia magnética pelas partículas e também uma menor dissipação térmica. A presença de estruturas em cadeia na suspensão aumenta χ'' e, conseqüentemente, melhora a produção de calor por dissipação de energia magnética. Destaca-se que a influência das interações hidrodinâmicas viscosas é mais evidente na presença de heterogeneidade da suspensão, pois as partículas formam estruturas heterogêneas como longas cadeias para valores mais altos de λ .

Os resultados das simulações mostraram que as interações hidrodinâmicas enfraquecem o efeito favorável das interações dipolares na produção de aquecimento magnético em suspensões heterogêneas. Visto que, as flutuações de velocidade produzidas pelas interações hidrodinâmicas na suspensão tendem a espalhar os aglomerados de partículas, evitando a formação dessas estruturas. Para valores pequenos de λ , a distribuição de partículas apresenta-se homogênea e isotrópica e os resultados numéricos considerando interações hidrodinâmicas se mostraram indistinguíveis em comparação com os resultados numéricos sem interações hidrodinâmicas.

Outro resultado importante observado, o número de Péclet, influencia fortemente a magnetohipertermia em frequências angulares moderadas do campo oscilatório aplicado, mesmo em regimes diluídos. Com uma pequena elevação do número de Péclet, observou-se uma melhora na geração de calor, em que a temperatura média de 42° C foi atingida para $Pe = 1.5$ em aproximadamente 2.5 vezes menor que para $Pe = 1$. Esse resultado sugere, do ponto de vista prático, que ao controlar esse parâmetro, pode esperar reduzir a fração volumétrica e conseqüentemente as doses de nanopartículas magnéticas injetadas em um tumor. Portanto, a geração de calor por dissipação de energia magnética pode ser melhorada por meio da combinação e controle dos parâmetros físicos, como α , λ , ϕ e Pe em frequências angulares moderadas, otimizando o desempenho de aquecimento em magnetohipertermia.

7.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Com base no que foi desenvolvido nesta tese, segue algumas sugestões para trabalhos futuros:

- Investigar outros modos de excitação de campo magnético aplicado (campos não senoidais e campo rotacional) e verificar se é possível melhorar o efeito de aquecimento para aplicação em magnetohipertermia com menores frações volumétricas de partículas.
- Verificar o efeito do número de Stokes rotacional (variações no atraso da resposta rotacional das partículas à ação de torques externos) na taxa média de aumento de temperatura.
- Testar a implementação de um campo magnético estático durante um intervalo de tempo, antes de aplicar o campo magnético oscilatório para checar se as cadeias formadas durante o campo estático afetam o desempenho da técnica de magnetohipertermia.
- Estudar uma possibilidade de implementar no código o efeito da camada de surfactantes para analisar a influência na resposta da susceptibilidade complexa da suspensão magnética e seus efeitos na taxa média de aumento de temperatura para aplicação de magnetohipertermia.
- Gerar um volume esférico excludente no qual as partículas não pudessem penetrar e fossem obrigadas a orbitar em torno deste volume. Dessa maneira, simular um tumor esférico em torno do qual as partículas estivessem livres para se movimentar. Assim, estudar como isso afetaria o desempenho da taxa média de aumento de temperatura e consequentemente da técnica de magnetohipertermia em função dos parâmetros físicos do problema e do raio do tumor.
- Realizar no código uma implementação de um gradiente radial de temperatura e atualizar o cálculo do número de Péclet local em função da temperatura local no box. Fazer isso considerando 1/4 de esfera não preenchida por partículas magnéticas num dos cantos do box para simular um pedaço do tumor.

- Implementação de uma função de distribuição radial no código para checar eventuais correlações entre microestrutura e resposta dos módulos da susceptibilidade complexa da suspensão magnética em função dos parâmetros físicos do problema.
- Verificar como implementar os efeitos de interação hidrodinâmica no movimento rotacional das partículas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abade, G. C., 2005, *Mecânica da Sedimentação de Partículas Esféricas Interagindo Hidrodinamicamente*, Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília.
- Abu-Bakr, A. F. and Zubarev, A. Y., 2019, *Hyperthermia in a system of interacting ferromagnetic particles under rotating magnetic field*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 477, 404-407.
- Alegretti, C. F., 2017, *Uma nova perspectiva em Ferrohidrodinâmica: Controle de Descolamento de Camada Limite*, Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília.
- Apostolov, A. T., Apostolova, I. N. e Wesselinowa J. M., 2011, *MO.Fe₂O₃ nanoparticles for self-controlled magnetic hyperthermia*, Journal of Applied Physics. 109, 083939.
- Aris, R., 1962 *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*, New York: Dover Publications, INC.
- Astefanoaei, I., Dumitru, I., Chiriac, H., Stancu A., 2014, *Controlling temperature in magnetic hyperthermia with low Curie temperature particles*, Journal of Applied Physics. 115, 17B531.
- Astefanoaei, I., Dumitru, I., Chiriac, H., Stancu, A., 2016, *Thermofluid Analysis in Magnetic Hyperthermia Using Low Curie Temperature Particles*, IEEE Transactions on Magnetism, Vol. 52, 7.
- Bacri, J. C., Perzynski, R., Shliomis, M. I. and Burde, G. I., 1995, *Negative-Viscosity: Effect in a Magnetic Fluid*, Physical Review Letters, vol. 75, N 11.

- Banchio, A.J., Brady, J.F., 2003, *Accelerated Stokesian dynamics: Brownian motion*, J. Chem. Phys., vol. 118, 10323-10332.
- Basset, A. B., 1888, *A Treatise on Hydrodynamics*, Deighton Bell, Cambridge, United Kingdom.
- Bashtovoi, V., Kuzhir, P., Reks, A., 2002, *Capillary ascension of magnetic fluids*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 252, 265-267.
- Batchelor, G. K., 1967, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Batchelor, G. K., 1976, *Developments in microhydrodynamics*, Ed. W. Koiter, Amsterdam, Netherlands, 33 p.
- Batrudinov, T. M., Ambarov, A. V., Elfimova, E. A., Zverev, V. S., Ivanov, A. O., 2017, *Theoretical study of the dynamic magnetic response of ferrofluid to static and alternating magnetic fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 431, pp. 180-183.
- Beenakker, C. W. J., 1986, *Ewald Sum of the Rotne-Prager Tensor*, J. Chem. Phys., 853, pp. 1581-1582.
- Berkov, D. V., Gorn, N. L., 2001, *Susceptibility of the disordered system of fine magnetic particles: a Langevin-dynamics study*, J. Phys.: Condens. Matter, 13, 9369-9381.
- Berkov, D. V., Gorn, N. L., Stock, D., 2007, *Simulations of ferrofluid dynamics: Rigid dipoles model versus particles with internal degrees of freedom*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 310, 1015-1016.
- Berkov, D. V., Iskakova, L. Y., Zubarev, A. Y., 2009, *Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids*, Physical Review E, 79, 021407.
- Bird, R. B., Armstrong, R. C., Hassager, O., 1987, *Dynamic of Polymeric Liquids*, Volume 1: Fluid Mechanics, Second Edition.
- Born, M., Huang, K., 1954. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford, Clarendon Press.
- Boroon, M. P., Ayani, M. B., Bazaz, S. R., 2018, *Estimation of the optimum number and location of nanoparticle injections and the specific loss power for ideal hyperthermia*, Journal of Thermal Biology, 72, 127-136.

- Branquinho, L. C., Carria, M. S., Costa, A. S., Zufelato, N., Sousa, M. H., Miotto, R., Ivkov, R., Bakuzis, A. F., 2013, *Effect of magnetic dipolar interactions on nanoparticle heating efficiency: Implications for cancer hyperthermia*, Scientific Reports, 3:2887.
- Cabrera, D., Camarero, J., Ortega, D., Teran, F. J., 2015, *Influence of the aggregation, concentration, and viscosity on the nanomagnetism of iron oxide nanoparticle colloids for magnetic hyperthermia*, J Nanopart Res, 17:121.
- Carrey, J., Mehdaoui, B., Respaud, M., 2011, *Simple models for dynamic hysteresis loop calculations of magnetic single-domain nanoparticles: Application to magnetic hyperthermia optimization*, Journal of Applied Physics, 109, 083921.
- Chiriac, H., and Stoian, G., 2009, *Influence of particle size distributions on magnetorheological fluid performances*, Journal of Physics: Conference Series 200, 072095.
- Coisson, M., Barrera, G., Celegato, F., Martino, L., Vinai, F., Martino, P., Ferraro, G., Tiberto, P., 2016, *Specific absorption rate determination of magnetic nanoparticles through hyperthermia measurements in non-adiabatic conditions*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 415, 2-7
- Coisson, M., Barrera, G., Celegato, F., Martino, L., Kane, S. N., Raghuvanshi, S., Vinai, F., Tiberto, P., 2017, *Hysteresis losses and specific absorption rate measurements in magnetic nanoparticles for hyperthermia applications*, Biochimica et Biophysica Acta, 1861, 1545-1558.
- Cole, A. J., Yang, V. C., David, A. E., 2011, *Cancer Theranostics: The Rise of Targeted Magnetic Nanoparticles*, Trends Biotechnol, 29, 323-332.
- Conde-Leborán, I., Serantes, D., Baldomir, D., 2015, *Orientation of the magnetization easy axes of interacting nanoparticles: Influence on the hyperthermia properties*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 380, 321-324.
- Connord, V., Mehdaoui, B., Tan, R., P., Carrey, J., Respaud, M., 2014, *An air-cooled Litz wire coil for measuring the high frequency hysteresis loops of magnetic samples: A useful setup for magnetic hyperthermia applications*, Review of Scientific Instruments. 85, 093904.
- Cullity, B. D., Graham, C. D., 2009, *Introduction to Magnetic Materials*, 2 Ed. IEEE Press. John Wiley and Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. ISBN 978-0-471-47741-9.

- Cunha, F. R., 1995, *Hydrodynamic Dispersion in Suspensions*, Ph.D. Thesis, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, Cambridge University, Cambridge, UK.
- Cunha, F. R., Sousa, A. J., Morais, P. C., 2002, *The dynamic behavior of a collapsing bubble in a magnetic fluid*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 252, 271-275.
- Cunha, F. R., Sobral, Y. D., 2004, *Characterization of the physical parameters in a process of magnetic separation and pressure-driven flow of a magnetic fluid*, *Physica A*, 343, 36-64.
- Cunha, F. R., Couto, H. L. G., 2008, *A new boundary integral formulation to describe three-dimensional motions of interfaces between magnetic fluids*, *Applied Mathematics and Computation*, 199 70-83.
- Cunha, F. R., 2012, *Fundamentals of Magnetic Fluid Hydrodynamics, in Turbulence*, (Book Chapter). [S.l.]: Poli-USP-ABCM.
- Cunha, F. R., Sobral, Y. D., Gontijo, R. G., 2013, *Stabilization of concentration waves in fluidized beds of magnetic particles*, *Powder Technology*, 241 219-229.
- Cunha, F. R., *Notas de Aula do curso de Microhidrodinâmica*, 2016.
- Dang, A., Ooi, L., Fales, J., Stroeve, P., 2000, *Yield Stress Measurements of Magnetorheological Fluids in Tubes*, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 39, 2269-2274.
- Das, P., Colombo, M., Prospero, D., 2019, *Recent advances in magnetic fluid hyperthermia for cancer therapy*, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 174, 42-55.
- Day, E. S., Morton, J. G., West, J. L., 2009, *Nanoparticles for Thermal Cancer Therapy*, *ASME J. Biomech. Eng.* 131, 074001.
- Deatsch, A. E., Evans, B. A., 2014, *Heating efficiency in magnetic nanoparticle hyperthermia*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 354, pp 163-172.
- Egolf, P. W., Shamsudhin, N., Pan, S., Pawlowski, A. G., Tsague, P., Marco, B., Bovy, W., Tucev, S., Ansari, M. H. D., Nelson, B. J., 2016, *Hyperthermia with rotating magnetic nanowires inducing heat into tumor by fluid friction*, *Journal of Applied Physics*, 120, 064304.

- Einstein, A., 1956, *Investigations on the theory of the Brownian Movement*, Dover Publications, New York.
- Ewald, P. P. 1921, *Die Berechnung Optischer und Elektrostatischer Gitterpotentiale*, Ann. Phys. Lpz., Vol. 64, p. 253.
- Fannin, P. C., Scaife, B. K. P., Charles, S. W., 1988, *On the analysis of complex susceptibility data of ferrofluids ferrofluids*, Journal of Physics D: Applied Physics, 21, 1035.
- Fannin, P. C., Charles, S. W., Relihan, T., 1995, *On the influence of inertial effects, arising from rotational Brownian motion, on the complex susceptibility of ferrofluids*, J. Phys. D: Appl. Phys., 28, 1765.
- Farjoud, A., Cavey, R., Ahmadian, M. and Craft, M., 2009, *Magneto-rheological fluid behavior in squeeze mode*, Smart Mater. Struct. 18 095001 (7pp).
- Gangwar, A., Varghese, S. S., Meena, S. S., Prajapat, C. L., Gupta, N., Prasad, N. K., 2019, *Fe₃C nanoparticles for magnetic hyperthermia application*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 481, 251-256.
- Garaio, E., Collantes, J. M., Garcia, J. A., Plazaola, F., Mornet, S., Couillaud, F., Sandre, O., 2014, *A wide-frequency range AC magnetometer to measure the specific absorption rate in nanoparticles for magnetic hyperthermia*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 368, pp. 432-437.
- Garaio, E., Sandre, O., Collantes, J. M., Garcia, J. A., Mornet, S., Plazaola, F., 2015, *Specific absorption rate dependence on temperature in magnetic field hyperthermia measured by dynamic hysteresis losses (ac magnetometry)*, Nanotechnology, 26 015704.
- Georgii, H. O., Zagrebnov, V., 1998, *On the Interplay of Magnetic and Molecular Forces in Curie-Weiss Ferrofluid Models*, Journal of Statistical Physics, Vol. 93, Nos. 1/2.
- Gontijo, R. G. and Cunha, F. R., 2012, *Experimental Investigation on Thermo-Magnetic Convection Inside Cavities*, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol. 12, 1-10.
- Gontijo, R. G., 2013, *Micromechanics and microhydrodynamics of magnetic suspensions*, Ph.D. thesis, Department of Mechanical Sciences, University of Brasília.

- Gontijo, R. G. and Cunha, F. R., 2015, *Dynamic numerical simulations of magnetically interacting suspensions in creeping flow*, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Powder Technology, 279, 146-165.
- Gontijo, R. G. and Cunha, F. R., 2017, *Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions*, Physics of Fluids, 29, 062004.
- Guimarães, A. B., Cunha, F. R. and Gontijo, R. G., 2020, *The influence of hydrodynamic effects on the complex susceptibility response of magnetic fluids undergoing oscillatory fields: New insights for magnetic hyperthermia*, Physics of Fluids, 32, 012008.
- Hadavand, M., Nabovati, A., Sousa, A. C. M., 2013, *Ferrofluid Permeation into Three-Dimensional Random Porous Media: A Numerical Study Using the Lattice Boltzmann Method*, Transp. Porous Med., 99, 191-206.
- Hirabayashi, M., Chen, Y., Ohashi, H., 2001, *New Lattice-Boltzmann Model for Magnetic Fluids*, Physical Review Letters, Vol. 87, N 17.
- Holm, C., Weis, J. J., 2005, *The structure of ferrofluids: A status report*, Current Opinion in Colloid and Interface Science 10, 133-140.
- Ilg, P., 2008, *Importance of depletion interactions for structure and dynamics of ferrofluids*, Eur. Phys. J. E, 26, 169-176.
- Ivanov, A. O., Kuznetsova, O. B., 2001, *Magnetic properties of dense ferrofluids: An influence of interparticle correlations*, Physical Review, volume 64, 041405.
- Ivanov, A. O., Wang, Z., Holm, C., 2004, *Applying the chain formation model to magnetic properties of aggregated ferrofluids*, Physical Review E, 69, 031206.
- Jansons, K. M., 1983, *Determination of the constitutive equations for a magnetic fluid*, J. Fluid Mech., vol. 137, pp . 187-216.
- Kafrouni, L., Savadogo, O., 2016, *Recent progress on magnetic nanoparticles for magnetic hyperthermia*, Prog Biomater, 5. 147-160.
- Kappiyoor, R., Liangruksa, M., Ganguly, R. e Puri, I. K., 2010, *The effects of magnetic nanoparticle properties on magnetic fluid hyperthermia*, Journal of Applied Physics, 108, 094702.

- Kim, S., Karrila, S. J., 1991, *Microhydrodynamics: principles and selected applications*, Butterworth - Heinemann.
- Kita, E., Oda, T., Kayano, T., Sato, S., Minagawa, M., Yanagihara, H., Kishimoto, M., Mitsumata, C., Hashimoto, S., Yamada, K., e Ohkohchi, N., 2010, *Ferromagnetic nanoparticles for magnetic hyperthermia and thermoablation therapy*, J. Phys. D: Appl. Phys, 43, 474011.
- Kristóf, T., Szalai, I., 2003, *Magnetic properties and structure of polydisperse ferrofluid models*, Physical Review E, 68, 041109.
- Kuhara, M., Takeyama, H., Tanaka, T., Matsunaga, T., 2004, *Magnetic Cell Separation Using Antibody Binding with Protein A Expressed on Bacterial Magnetic Particles*, Anal. Chem. 2004, 76, 6207-6213.
- Kusigerski, V., Illes, E., Blanusa, J., Gyergyek, S., Boskovic, M., Perovic, M., Spasojevic, V., 2019, *Magnetic properties and heating efficacy of magnesium doped magnetite nanoparticles obtained by co-precipitation method*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 475, 470-478.
- Lahiri, B. B., Muthukumaran, T., Philip, J., 2016, *Magnetic hyperthermia in phosphate coated iron oxide nanofluids*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 407, 101-113.
- Landi, G. T., Bakuzis, A. F., 2012, *On the energy conversion efficiency in magnetic hyperthermia applications: A new perspective to analyze the departure from the linear regime*, Journal of Applied Physics, 111, 083915.
- Landi, G. T., 2013, *Simple models for the heating curve in magnetic hyperthermia experiments*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 326, pp. 14-21.
- Landi, G. T., Arantes, F. R., Cornejo, D. R., Bakuzis, A. F., Andreu, I., Natividad, E., 2017, *AC susceptibility as a tool to probe the dipolar interaction in magnetic nanoparticles*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 421, pp. 138-151.
- Ladyzheskaya, O. A., 1969, *The mathematical theory of viscous incompressible flow*, Gordon and Breach, New York.

- Laurent, S., Dutz, S., Hafeli, U. S., Mahmoudi M., 2011, *Magnetic fluid hyperthermia: Focus on superparamagnetic iron oxide nanoparticles*, Advances in Colloid and Interface Science, 166 pp 8-23.
- Lázaro, F. J., Abadía, A. R., Romero, M. S., Gutiérrez, L., Lázaro, J., Â Morales, M. P., 2005, *Magnetic characterisation of rat muscle tissues after subcutaneous iron dextran injection*, Biochim Biophys Act, 10, 1740, 434-45.
- Leite, E. S., 2013, *Estudo das Propriedades Magnéticas de Nanopartículas de Maghemita dispersas em Óleos Magnéticos Isolantes*, Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade de Brasília.
- Li, D. D., Yeoh, G. H., Timchenko, V., Lam, H. F., 2017, *Numerical Modeling of Magnetic Nanoparticle and Carrier Fluid Interactions Under Static and Double-Shear Flows*, IEEE Transactions on Nanotechnology, Vol. 16, N 5.
- Lindner, J., Menzel, K., Nirschl, H., 2013, *Simulation of magnetic suspensions for HGMS using CFD, FEM and DEM modeling*, Computers and Chemical Engineering, 54, 111-121.
- Lipnicki, Z. and Waloryszek, D., 2005, *Evaporation of the Heterogenous Liquid Flow Forced by Magnetc Field Over a Wall*, PAMIR Conference on Fundamental and Applied MHD.
- Liu, T., Gu, R., Gong, X., Xuan, S., Wu, W., Zhang, Z., 2010, *Structural and Rheological Study of Magnetic Fluids Using Molecular Dynamics*, Magnetohydrodynamics, Vol. 46, N 3, pp. 257-269.
- Ludwig, F., Balceris, C., Jonasson, C., Johansson, C., 2017, *Analysis of AC Susceptibility Spectra for the Characterization of Magnetic Nanoparticles*, IEEE Transactions on Magnetcs, vol. 53, N. 11, 6100904.
- Maenosono, S. and Saita, S., 2006, *Theoretical Assessment of FePt Nanoparticles as Heating Elements for Magnetic Hyperthermia*, IEEE Transactions on Magnetcs, vol. 42, N. 6, 1638-1642.
- Malaescu, I., Fannin, P. C., Marin, C. N., Lazic, D., 2018, *The concept of ferrofluid preheating in the treatment of cancer by magnetic hyperthermia of tissues*, Medical Hypotheses, 110, 76-79.

- Marin, C. N., Malaescu, I., Fannin, P. C., 2015, *Theoretical evaluation of the heating rate of ferrofluids*, J Therm Anal Calorim, 119, 1199-1203.
- Mehdaoui, B., Meffre, A., Lacroix, L., M., Carrey, J., Lachaize, S., Respaud, M., Gougeon, M., e Chaudret, B., 2010, *Magnetic anisotropy determination and magnetic hyperthermia properties of small Fenanoparticles in the superparamagnetic regime*, Journal of Applied Physics 107, 09A324.
- Miaskowski, A., Sawicki, B., 2013, *Magnetic Fluid Hyperthermia Modeling Based on Phantom Measurements and Realistic Breast Model*, IEEE Transactions on Biomedical Engineering, Vol. 60, N 7.
- Moroz, P., Jones, S. K., Gray, B. N., 2002, *Magnetically mediated hyperthermia: current status and future directions*, International Journal of Hyperthermia, vol. 18, n. 4, pp. 267-284.
- Munoz-Menendez, C., Serantes, D., Ruso, J. M., Baldomir, B., 2017, *Towards improved magnetic fluid hyperthermia: major-loops to diminish variations in local heating*, Phys. Chem. Chem. Phys, 19, 14527.
- Murase, K., Oonoki, J., Takata, H., Song, R., Angraini, A., Ausanai, P., Matsushita, T., 2011, *Simulation and experimental studies on magnetic hyperthermia with use of superparamagnetic iron oxide nanoparticles*, Radiol Phys Technol, 4, 194-202.
- Natividad, E., Andreu, I., 2017, *Omitting the need of external heat capacity data in an adiabatic magnetothermal setup devoted to the characterization of nanomaterials for magnetic hyperthermia*, Applied Thermal Engineering, 117, 409-416.
- Nemala, H., Thakur, J. S., Naik, V. M., Vaishnava, P. P., Lawes, G., Naik, R., 2014, *Investigation of magnetic properties of Fe₃O₄ nanoparticles using temperature dependent magnetic hyperthermia in ferrofluids*, Journal of Applied Physics, 116, 034309.
- Odenbach, S., 2003, *Magnetic fluids&suspensions of magnetic dipoles and their magnetic control*, J. Phys. Condens. Matter, 15 S1497.
- Odenbach, S., 2009, *Colloidal Magnetic Fluids: Basics, Development and Application of Ferrofluids*, Springer, Berlin Heidelberg, 1st edition.

- Osaka, T., Matsunaga, T., Nakanishi, T., Arakaki, A., Niwa, D. and Iida, H., 2006, *Synthesis of magnetic nanoparticles and their application to bioassays*, Anal Bioanal Chem 384, 593-600.
- Oseen, C.W., 1910, *Über die Stokessche Formel und über die verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik*, Arkiv for Matematik, Astronomi och Fysik 6, N 29.
- Padding, J. T., Louis, A. A., 2004, *Hydrodynamic and Brownian Fluctuations in Sedimenting Suspensions*, Physica Review Letters, 93, 220601, 1-4.
- Pankhurst, Q. A., Connolly, J., Jones, S. K., Dobson, J., 2003, *Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine*, Journal of Physics D: Applied Physics, 36, pp. 167-181.
- Park, G. S. and Park, S. H. 1999, *Design of Magnetic Fluid Linear Pump* IBEE Transactions on Magnetics, vol. 35, N 5.
- Park, G. S. and Park, S. H., 2002, *Determination of the Curvature of the Magnetic Fluid Under the External Forces*, IEEE Transactions on Magnetics, vol. 38, N 2.
- Raikher, Y. L., Stepanov, V. Y., 2014, *Physical aspects of magnetic hyperthermia: Low-frequency ac field absorption in a magnetic colloid*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 368, pp. 421-427.
- Rinaldi, C., Chaves, A., Elborai, S., He, X., Zahn, M., 2005, *Magnetic fluid rheology and flows*, Current Opinion in Colloid and Interface Science, 10, 141-157.
- Rinaldi, C., Chaves, A., Elborai, S., He, X., Zahn, M., 2005, *Magnetic fluid rheology and flows*, Current Opinion in Colloid and Interface Science 10, 141-157.
- Roca, A. G., Wiese, B., Timmis, J., Vallejo-Fernandez, G., OGrady, K., 2012, *Effect of Frequency and Field Amplitude in Magnetic Hyperthermia* IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 48, N 11.
- Rosa, A. P., 2014, *Análise Numérica e Experimental da Reologia e Microestrutura de Suspensões Magnéticas*, Dissertação de mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília.
- Rosa, A. P., Abade, G. C., Cunha, F. R., 2017, *Computer simulations of equilibrium magnetization and microstructure in magnetic fluids*, Physics of Fluids, 29, 092006.
- Rosensweig, R. E., 1985, *Ferrohydrodynamics*, Dover Publications, New York, 1985.

- Rosensweig, R. E., 2002, *Heating magnetic fluid with alternating magnetic field*, J. Magn. Magn. Mater., 252, 370374, 370-374.
- Rotne, J. e Prager, S., 1969, *Variational Treatment of Hydrodynamic Interaction in Polymers*, J. Chem. Phys., 5011, pp. 4831-4837.
- Rychkov, Y. M., Polyagoshko, Y. G., Esipok, A. V., 2006 *Influence of Magnetic Field on Viscosity of Suspensions Based on Duste Iron Powder*, ournal of Engineering Physics and Thermophysics, Vol. 79,N 6.
- Sadat, M. E., Patel, R., Sookoor, J., Bud'ko, S. L., Ewing, R. C., Zhang, J., Xu, H., Wang, Y., Pauletto, G. M., Mast, D. B., Shi, D., 2014, *Effect of spatial confinement on magnetic hyperthermia via dipolar interactions in Fe₃O₄ nanoparticles for biomedical applications*, Materials Science and Engineering, 42, pp. 52-63.
- Sasayama, T., Yoshida, T., Tanabe, K., Tsujimura, N., Enpuku, K., 2015, *Hysteresis Loss of Fractionated Magnetic Nanoparticles for Hyperthermia Application*, IEEE Transactions in Magnetism, Vol. 51, N 11.
- Silva, A. C., 2015, *Avaliação Experimental e Teórica da Hipertermia Magnética de Magnetolipossomos para Tratamento Oncológico*, Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás.
- Silva, J. M., Lima, J. A. S., 2007, *Quatro Abordagem para o movimento browniano*, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol. 29, n. 1, pp. 25-35.
- Shliomis, M. I., 1972, *Effective Viscosity of Magnetic Suspensions*, Soviet Physics Jept, Vol. 34, N 6.
- Shliomis, M. I. e Morozov, K. I., 1994, *Negative Viscosity of Ferrofluid under Alternating Magnetic Field*, Phys. Fluids, Vol. 6, pp. 2855-2861.
- Shokuhfar, A., Afghahi, S., S., S., 2013, *The heating effect of iron-cobalt magnetic nanofluids in an alternating magnetic field: application in magnetic hyperthermia treatment*, Shokuhfar and Seyyed Afghahi Nanoscale Research Letters, Vol. 8, pp 540.
- Sobral, Y. D. and Cunha, F. R., 2003, *A stability analysis of a magnetic fluidized bed*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 258-259, 464-467.

- Sobral, Y. D., Oliveira, T. F. e Cunha, F. R., 2007, *Unsteady forces during the motion of a sedimenting particle*, Journal of Powder Technology, Vol. 178, pp. 129-141.
- Soto-Aquino, D., Rinaldi, C., 2015, *Nonlinear energy dissipation of magnetic nanoparticles in oscillating magnetic fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 393, pp. 46-55.
- Timko, M., Kopcansky, P., Marton, K., Tomco, L. and Koneracká, M., *Dielectric properties of transformer paper impregnated by mineral oil based magnetic fluid*, Journal of Physics: Conference Series, 200, 072099.
- Vallejo-Fernandez, G., O'Grady, k., 2013, *Effect of the distribution of anisotropy constants on hysteresis losses for magnetic hyperthermia applications*, Appl. Phys. Lett. 103, 142417.
- Verde, E. L., Landi, G. T., Gomes, J. A., Sousa, M. H., Bakuzis, A. F., 2012, *Magnetic hyperthermia investigation of cobalt ferrite nanoparticles: Comparison between experiment, linear response theory, and dynamic hysteresis simulations*, Journal of Applied Physics, 111, 123902.
- Wang, Z., Holm, C., Muller, H. W., 2002, *Molecular dynamics study on the equilibrium magnetization properties and structure of ferrofluids*, Physical Review E, 66, 021405.
- Wu, K., Wang, J. P., 2017, *Magnetic hyperthermia performance of magnetite nanoparticle assemblies under different driving fields*, AIP Advances 7, 056327, 10.1063/1.4978458.
- Xuan, Y., Ye, M., Li, Q., 2005, *Mesoscale simulation of ferrofluid structure*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 48, 2443-2451.
- Yasemian, A. R., Kashi, M. A., Ramazani, A., 2019, *Surfactant-free synthesis and magnetic hyperthermia investigation of iron oxide (Fe_3O_4) nanoparticles at different reaction temperatures*, Materials Chemistry and Physics, 230, 9-16.
- Yoza, B., Arakaki, A., Maruyama, K., Takeyama, H., Matsunaga, T., 2003, *Fully automated DNA extraction from blood using magnetic particles modified with a hyperbranched polyamidoamine dendrimer*, J Biosci Bioeng, 95, 21-6.
- Yoshida, T., Matsugi, Y., Tsujimura, N., Sasayama, T., Enpuku, k., Viereck, t., Schilling, m., Ludwig, f., 2017, *Effect of alignment of easy axes on dynamic magnetization of*

- immobilized magnetic nanoparticles*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 427, 162-167.
- Zahn, M. and Greer, D. R., 1995, *Ferrohydrodynamic pumping in spatially uniform sinusoidally time-varying magnetic fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 149 165-173.
- Zubarev, A. Y., Odenbach, S., Fleischer, J., 2002, *Rheological properties of dense ferrofluids. Effect of chain-like aggregates*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 252, 241-243.
- Zubarev, A. Y., Abu-Bakr, A. F., Iskakova, L. Y., Bulycheva, S. V., 2015, *hyperthermia in a system of magnetically interacting particles*, Magnetohydrodynamics, Vol. 51 , No. 4, pp. 647-654.
- Zubarev, A. Y., Iskakova, L. Y., Abu-Bakr, A. F., 2015, *Effect of interparticle interaction on magnetic hyperthermia in ferrofluids*, Physica A, 438, 487-492.
- Zubarev, A. Y., Yushkov, A. V. 1998, *Dynamic properties of moderately concentrated magnetic liquids*, Journal of Experimental and Theoretical Physics, Vol. 87, N. 3.
- Zubarev, A. Y., Iskakova, A. Y., Abu-Bakr, A. F., 2017, *Magnetic hyperthermia in solid magnetic colloids*, Physica A, 467, 59-66.
- Zubarev, A. Y., 2019, *Effect of internal chain-like structures on magnetic hyperthermia in nonliquid media*, Philosophical Transactions of The Royal Society A, 377, 20180213.
- Zubko, V. I., Lesnikovich, A. I., Zubko, D. V., 2004, *Influence of the Composition and Temperature of Concentrated Magnetic Fluids on their Electrophysucal Properties for Different Frenquencies of the Eletric Field*, Journal of Engineering Physics and Thermophysics, Vol. 77, N 1.
- Zubieta, M., Eceolaza, S., Elejabarrieta m. L. and Bou-Ali, M. M., 2009, *Magnetorheological fluids: characterization and modeling of magnetization*, Smart Mater. Struct., 18, 095019.

APÊNDICES

I. ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

I.1 Adimensionalização das Equações Governantes para uma Suspensão de Partículas Magnéticas sem Interações Hidrodinâmicas

Aplicando as seguintes escalas características, para a adimensionalização das equações governantes (2.71) e (2.72).

$$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_s}, \quad \tilde{t} = \frac{tU_s}{a}, \quad \tilde{\boldsymbol{\omega}} = \frac{\boldsymbol{\omega}a}{U_s}, \quad (\text{I.1})$$

segue-se que

$$\begin{aligned} \frac{mU_s^2}{a} \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_i}{dt} &= -6\pi\eta a U_s \tilde{\mathbf{u}}_i + \Delta\rho\mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}U_s}{a\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4 r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] \\ &+ \left(\frac{\mu_0 H_0 m_i}{a} \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}} \right) + \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda 6\pi\eta a U_s |\tilde{\mathbf{u}}_i| e^{(-\frac{a\epsilon_{ij}}{y})} \hat{\mathbf{e}}_r \\ &+ \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} \Upsilon E b^{1/2} (a\epsilon_{ij})^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

em que $\hat{\mathbf{h}} = \mathbf{H}/H_0$ e $U_s = (2/9\eta)\Delta\rho g a^2$ é a velocidade de Stokes da partícula. Dividindo toda a equação (I.2) por $6\pi\eta a U_s$, obtém-se que

$$\begin{aligned} \left(\frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \right) \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_i}{dt} &= -\tilde{\mathbf{u}}_i + \frac{\Delta\rho\mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3}{6\pi\eta a U_s} + \left(\frac{6\mathcal{D}}{U_s a \delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} \frac{1}{r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right. \\ &- \left. 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] + \left(\frac{\mu_0 H_0 m_i}{6\pi\eta a^2 U_s} \right) \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}} \\ &+ \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda 6\pi\eta a U_s |\tilde{\mathbf{u}}_i| e^{(-\frac{a\epsilon_{ij}}{y})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} \frac{\Upsilon E b^{1/2} (a\epsilon_{ij})^{3/2}}{6\pi\eta a U_s} \hat{\mathbf{e}}_r. \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

O número de Stokes e Péclet, são dados respectivamente, por

$$St = \left(\frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \right), \quad Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}}, \quad (I.4)$$

fazendo $m_i = m_j = m_d$, segue-se que

$$\begin{aligned} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} &= \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} \frac{k_B T}{k_B T} \\ &= \left(\frac{3\mu_0 m_d^2}{4\pi a^3 k_B T} \right) \left(\frac{k_B T}{6\pi\eta a U_s a} \right) \\ &= \frac{24\lambda}{Pe}, \end{aligned} \quad (I.5)$$

em que $\lambda = \mu_0 m_d^2 / 4\pi k_B T d^3$ é a razão entre essa força de interação partícula-partícula e a força browniana, e o parâmetro $\alpha = \mu_0 m_d H_0 / k_B T$ é definido como a razão entre a força de interação partícula-campo e força browniana. No contexto de suspensões coloidais, o termo $\mu_0 m_d H_0 / 6\pi\eta a^2 U_s$ na equação (I.3), pode ser expresso como

$$\frac{\mu_0 m_d H_0}{6\pi\eta a^2 U_s} = \frac{\mu_0 m_d H_0}{6\pi\eta a^2 U_s} \frac{k_B T}{k_B T} = \frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T} \frac{\mathcal{D}}{U_s a} = \frac{\alpha}{Pe}. \quad (I.6)$$

Portanto, substituindo os termos (I.4), (I.5) e (I.6) em (I.3), obtém-se

$$\begin{aligned} St \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_i}{dt} &= \tilde{\mathbf{u}}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe} \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}} + \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda |\tilde{\mathbf{u}}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} P_c (\epsilon_{ij})^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned} \quad (I.7)$$

no qual o raio a da partícula foi agregado nas constantes de calibração e

$$\hat{\mathbf{g}} = \frac{\Delta\rho\mathbf{g}(4/3)\pi a^3}{6\pi\eta a U_s}, \quad P_c = \frac{\overline{C} E_i a^{1/2}}{6\pi\eta a U_s}. \quad (I.8)$$

Usando novamente as escalas características (I.1) para a adimensionalização da equação do momento angular da partícula i , (eq. 2.72), obtém-se

$$\begin{aligned} St_r \frac{d\tilde{\boldsymbol{\omega}}}{dt} &= -\tilde{\boldsymbol{\omega}} + \left(\frac{6}{Pe_r \delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} - \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe_r} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\frac{1}{3} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{d}}_j) - (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe_r} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}), \end{aligned} \quad (I.9)$$

no qual, St_r , Pe_r , representam o número de Stokes e número de Péclet rotacionais respectivamente, definidos por

$$St_r = \frac{JU_s}{8\pi\eta a^4}, \quad Pe_r = \frac{U_s}{\mathcal{D}_r a}. \quad (\text{I.10})$$

Desta forma, as equações governantes adimensionais que rege o movimento translacional e rotacional de cada partícula da suspensão são dadas por (Gontijo e Cunha, 2015 e 2017)

$$St \frac{d\tilde{\mathbf{u}}_i}{dt} = \tilde{\mathbf{u}}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \tilde{\mathbf{f}}_m^i + \tilde{\mathbf{f}}_r^i + \tilde{\mathbf{f}}_c^i \quad (\text{I.11})$$

e

$$St_r \frac{d\tilde{\boldsymbol{\omega}}}{dt} = -\tilde{\boldsymbol{\omega}} + \left(\frac{6}{Pe_r\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \tilde{\mathbf{T}}_m^i \quad (\text{I.12})$$

em que

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_m^i &= \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} \left[(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + \hat{\mathbf{d}}_i (\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{d}}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - 5(\hat{\mathbf{d}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe} \hat{\mathbf{d}}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}}, \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_r^i = \sum_{\substack{2 < \epsilon_{ij} < 2.2, \\ i \neq j}} \Lambda |\tilde{\mathbf{u}}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{V}})} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (\text{I.14})$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_c^i = \sum_{\substack{\epsilon_{ij} < 2, \\ i \neq j}} P_c(\epsilon_{ij})^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r \quad (\text{I.15})$$

e

$$\tilde{\mathbf{T}}_m^i = \sum_{i \neq j} \frac{24\lambda}{Pe_r} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\frac{1}{3} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{d}}_j) - (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \frac{\alpha}{Pe_r} (\hat{\mathbf{d}}_i \times \hat{\mathbf{h}}). \quad (\text{I.16})$$

II. CÓDIGO NUMÉRICO PARA ABORDAGEM ANALÍTICA DA SUSCEPTIBILIDADE COMPLEXA

II.1 Código Numérico em Linguagem Fortran para o Cômputo dos Resultados Analíticos da Susceptibi- lidade Complexa

Para o cômputo dos resultados analíticos para a parte real e imaginária da susceptibilidade complexa, foi desenvolvido um código numérico em linguagem Fortran, considerando o desenvolvimento apresentado por Berkov et al. (2009) descrito na subseção (4.2). Dessa forma, segue-se os seguintes códigos.

```
program alphamag
implicit none

!Declaração de variáveis
double precision :: a, b, h, pi
integer :: M, i, n, j, k
double precision, allocatable :: y(:), t(:)
double precision :: k1, k2, k3, k4
double precision :: Dr, omega, phi, lambda, alpha

!Dados de entrada1-Parâmetros físicos
Pe = 1.0d0
omega = 1.0d0
phi = 0.10d0
alpha = 1.0d0
lambda = 1.0d0

!Dados de entrada2
pi = dacos(-1.d0)
a = 0.0d0
b = (2.0d0*pi/omega)*1000
M = 100000.d0
!Passo de tempo
```

```
h = (b-a)/(1.0d0*M)
```

```
!Aloca variáveis na memória
```

```
allocate (y(0:M), t(0:M))
```

```
!Condições de contorno
```

```
y(0) = 0.0001d0
```

```
t(0) = a
```

```
do i = 1, M
```

```
t(i) = a+i*h
```

```
end do
```

```
!**** RUNGE-KUTTA 4 ORDEM****
```

```
do i = 0, M-1
```

```
k1 = h*f(t(i), y(i))
```

```
k2 = h*f(t(i)+0.5d0*h, y(i)+0.5d0*k1)
```

```
k3 = h*f(t(i)+0.5d0*h, y(i)+0.5d0*k2)
```

```
k4 = h*f(t(i)+h, y(i)+k3)
```

```
y(i+1) = y(i)+(1.0d0/6.0d0)*(k1+2.0d0*k2+2.0d0*k3+k4)
```

```
end do
```

```
!Arquivo de saída
```

```
open(unit = 10, file = 'arquivo1.plt', status = 'unknown')
```

```
do j = 0, M
```

```
write (10,*) t(j), y(j)
```

```
end do
```

```
close(unit = 10)
```

```
contains
```

```
function f(var1,var2) ! Aqui f = dy/dt com f(x,y)
```

```
implicit none
```

```
double precision :: f, var1,var2
```

```
f = ((-2.0d0)*((0.75d0)/(Pe*var2))*(var2-alpha*dsin(omega*var1))*(1.0d0/dtanh(var2) &  
-1.0d0/var2))/(1.0d0/var2*-0.65cm*2-1.0d0/dsinh(var2)**2 &  
+8.0d0*phi*lambda*((1.0d0/var2**2-1.0d0/dsinh(var2)**2)**2+(1.0d0/dsinh(var2)&  
-1.0d0/var2)*(-2.0d0/var2**3+2.0d0*(1.0d0/dtanh(var2))*(1.0d0/dsinh(var2)**2)))
```

```
end function f
```

```
end program alphamag
```

```
program suscept
```

```
implicit none
```

```
integer it
```

```

double precision :: t(100000), alpha(100000)
double precision :: somatorio, h, h0, somatorio1
double precision :: omega, pi, phi, lambda
pi=dacos(-1.0d0)

```

```

!LER ARQUIVO DE DADOS

```

```

open(unit = 101, file = 'arquivo1.plt')
read(101,*)
do it = 1,100000
read(101,*) t(it), alpha(it)
end do

```

```

!FECHA ARQUIVO DE DADOS

```

```

close(unit = 101)

```

```

!Dados de entrada1-Parâmetros físicos

```

```

phi = 0.10d0

```

```

lambda = 1.0d0

```

```

omega = 4.0d0

```

```

h0 = 0.1

```

```

somatorio = 0.0

```

```

do it = 1, 99999

```

```

h = t(it+1)-t(it)

```

```

somatorio = somatorio + (h/2.0d0)*((omega/(2.0d0*pi*1000.0d0*h0))* &
((1.0d0/dtanh(alpha(it+1))-1.0d0/alpha(it+1)+8.0d0*phi*lambda* &
(1.0d0/(dtanh(alpha(it+1)))-1.0d0/(alpha(it+1))))* &
((1.0d0/alpha(it+1))**2-(1.0d0/dsinh(alpha(it+1)))**2)))*dcos(omega*t(it+1)) &
+(omega/(2.0d0*pi*1000.0d0*h0))*((1.0d0/dtanh(alpha(it))-1.0d0/alpha(it) &
+8.0d0*phi*lambda*(1.0d0/(dtanh(alpha(it)))-1.0d0/(alpha(it))))* &
((1.0d0/alpha(it))** 2-(1.0d0/dsinh(alpha(it)))**2)))*dcos(omega*t(it)))
end do

```

```

somatorio1 = 0.0

```

```

do it = 1, 99999

```

```

h = t(it+1)-t(it)

```

```

somatorio1 = somatorio1 + (h/2.0d0)*((omega/(2.0d0*pi*1000.0d0*h0))* &
((1.0d0/dtanh(alpha(it+1))-1.0d0/alpha(it+1)+8.0d0*phi*lambda* &
(1.0d0/(dtanh(alpha(it+1)))-1.0d0/(alpha(it+1))))* &
((1.0d0/alpha(it+1))**2-(1.0d0/dsinh(alpha(it+1)))**2)))*dsin(omega*t(it+1)) &
+(omega/(2.0d0*pi*1000.0d0*h0))*((1.0d0/dtanh(alpha(it))-1.0d0/alpha(it) &
+8.0d0*phi*lambda*(1.0d0/(dtanh(alpha(it)))-1.0d0/(alpha(it))))* &
((1.0d0/alpha(it))** 2-(1.0d0/dsinh(alpha(it)))**2)))*dsin(omega*t(it)))
end do

```

```
!Imprime na tela o resultado da integral
write(*,*) 'O resultado da Im(x) e:'
write(*,*) somatorio
write(*,*) 'O resultado da Re(x) e:'
write(*,*) somatorio1

end program suscept
```

Portanto, após a compilação destes dois programas, é obtido o valor da parte real e imaginária da susceptibilidade complexa para um fluido magnético submetido a um campo magnético oscilatório aplicado, de acordo com o desenvolvimento de Berkov et al. (2009). Destaca-se que os resultados dos gráficos referente a parte imaginária, foram considerados sem perda de generalidade, o valor absoluto.