

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO EM CIÊNCIAS MECÂNICAS

**MICROMECAÂNICA E MICROHIDRODINÂMICA DE
SUSPENSÕES MAGNÉTICAS**

RAFAEL GABLER GONTIJO

ORIENTADOR: FRANCISCO RICARDO DA CUNHA, Ph.D., UnB

PUBLICAÇÃO: TD-19A

BRASÍLIA/DF: 08 de Outubro de 2013.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

MICROMECAÂNICA E MICROHIDRODINÂMICA DE
SUSPENSÕES MAGNÉTICAS

RAFAEL GABLER GONTIJO

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

APROVADA POR:

Prof. Francisco Ricardo da Cunha, PhD (ENM-UnB)
(Orientador)

Prof. Hector Daniel Cenicerros, PhD (UCSB)
(Examinador Externo)

Prof. Paulo Cesar Philippi, Dr. Ing. (UFSC)
(Examinador Externo)

Prof. Gustavo Coelho Abade, Doutor (ENM-UnB)
(Examinador Interno)

Prof. José Luiz Alves da Fontoura Rodrigues, Docteur (ENM-UnB)
(Examinador Interno)

BRASÍLIA/DF, 08 DE OUTUBRO DE 2013.

FICHA CATALOGRÁFICA

GONTIJO, RAFAEL GABLER

Micromecânica e Microhidrodinâmica de Suspensões Magnéticas

[Distrito Federal] 2013.

xxviii, 262p., 297 mm (ENM/FT/UnB), Doutor, Ciências Mecânicas, 2013

Tese de Doutorado - Universidade de Brasília.

Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Microhidrodinâmica

2. Suspensões Magnéticas

3. Sistemas Particulados

4. Ferrofluidos

I. ENM/FT/UnB

II. TD 19A

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

GONTIJO., R. G. (2013). Micromecânica e Microhidrodinâmica de Suspensões Magnéticas. Tese de Doutorado em Ciências Mecânicas, Publicação ENM.TD - 19A, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 262p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Rafael Gabler Gontijo.

TÍTULO DA TESE DE DOUTORADO: Micromecânica e Microhidrodinâmica de Suspensões Magnéticas.

GRAU / ANO: Doutor / 2013

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.

Rafael Gabler Gontijo
SQN 311, Bloco C, Apto 114. Asa-Norte.
70.757-030 Brasília - DF - Brasil.

DEDICATÓRIA

“Dedico este trabalho à todas as pessoas que contribuíram para a minha formação pessoal e profissional e que me apoiaram emocionalmente ao longo da execução deste trabalho.”

AGRADECIMENTOS

Este trabalho durou cerca de 4 anos. Esse tempo foi suficiente para que vários acontecimentos moldassem a minha forma de ver o mundo. Ao longo dos últimos anos oscilei entre altos e baixos, mas sempre que precisei encontrei apoio naqueles que gostam de mim e desejam o meu melhor. Gostaria de agradecer a essas pessoas nessas páginas.

Agradeço à minha família que sempre me proporcionou condições de estudar para que eu chegasse até esta Tese de Doutorado. Por família incluo meus pais, Fernando e Márcia, minhas irmãs, Fernanda e Bárbara, meus avós, tias, primos e agregados. Particularmente gostaria de agradecer do fundo do meu coração meus pais, que sempre fizeram com que eu me sentisse muito amado e me apoiaram quando decidi abandonar meu emprego na Petrobras para me dedicar aos estudos e que mesmo eu tendo saído de casa ainda me acolhem com todo o carinho do mundo quando vou na casa deles filar comida na hora do almoço. Obrigado por tudo, pessoal! Amo vocês!

Agradeço à minha namorada querida, Sarinha, que ao longo dos últimos tempos apareceu de forma inesperada na minha vida e me proporcionou vários momentos maravilhosos, dos quais nunca me esquecerei e me apoiou quando precisei, inclusive em momentos extremamente complicados. Desculpa por todas as minhas loucuras, amor. Você sabe que eu te amo e o quanto é importante para mim, obrigado por tudo, querida. Luv u nigga! Agradeço também aos meus sogros, Helena e Roberto, que me acolheram como um filho, me aguentam nos almoços de semana e suportaram as longas horas que duraram a defesa dessa Tese. Gosto muito de vocês e só tenho a agradecer a forma que me acolheram! Obrigado pessoal!

Queria agradecer também às seguintes pessoas tão queridas: Tia Kátia, Tia Ina, Tia Dú, Tia Pá, Tia Fátima, Catarina, Auster, Zuleide, amo vocês e vocês sabem o quanto são importantes para mim!

Gostaria de fazer um agradecimento especial ao Professor Francisco Ricardo, que me ensinou tudo que alguém poderia querer aprender sobre Mecânica dos Fluidos nos últimos quatro anos. Apesar de ter sido meu Orientador de Doutorado, considero você muito mais do que isso, cara. Pode ter certeza que você é um grande amigo e um irmão meu e vai continuar sendo para sempre. Deixei de ser seu aluno de Doutorado e espero que agora a gente consiga seguir por esse caminho tortuoso que é fazer pesquisa no Brasil e quem sabe melhorar ao menos o nosso pequeno mundo como colegas de pesquisa. Se conseguirmos deixar a UnB e o Grupo melhor do que quando tudo isso

começou então valeu a pena o esforço. Valeu por tudo, brow!

Agradeço também aos amigos da época da Graduação: Dieggão, Birru, Topeira, Snoopy, Timbó, Abdalla, Dallyson e todos os outros pelo apoio e parceria ao longo dos 5 árduos anos nos quais estudamos juntos e pela amizade que se manteve desde que nos formamos em 2007. Agradeço ao meu amigo Cabeludo, que no momento está trilhando seu caminho de pesquisa em um Doutorado na Suécia! Espero que possamos trabalhar juntos e se aventurar por esse universo fantástico da Mecânica dos Fluidos, meu amigo!

Gostaria também de agradecer ao Fobinho e ao Piá, amigos pessoais antigos, que sempre estão aí para dar aquela força nos momentos legais e nos ruins! Vocês são brothers!

Agradeço ao Professor Paulo Morais do IF-UnB por ter participado do exame de qualificação da minha Tese de Doutorado, pelas excelentes sugestões dadas naquela oportunidade e por todo o incentivo à pesquisa de fluidos magnéticos no Vortex.

Não poderia deixar de agradecer a todos os colegas do Grupo Vortex, do qual me orgulho muito de fazer parte. Nunca esperaria encontrar pessoas tão legais no meio acadêmico, geralmente dominado por pessoas extremamente vaidosas com egos inflados e cheias de si. Considero amigos pessoais meus os Professores Gustavo Abade e Roberto Miserda e agradeço pelos papos divertidos no corredor da FT e nos churrascos do Grupo. Em especial agradeço também ao Prof. Gustavo Abade pelas dicas e sugestões dadas como membro examinador desta Tese. Gostaria de citar brevemente aqui o meu apreço por todos do grupo, incluindo meus amigos Nuno Dias e o Bráulio Pimenta, alunos de Doutorado, o grande Adriano Possebon, aluno de mestrado e o Edson Lucas, técnico do laboratório.

Agradeço também meu amigo e colega, Professor Yuri Sobral, por toda a força e apoio, além das excelentes discussões científicas sobre o problema de duas partículas durante a fase de publicação do nosso artigo no JMMM que me ensinaram muito. Valeu Yureba! Espero que possamos continuar pesquisando e publicando junto, meu amigo!

Preciso fazer um agradecimento especial ao Prof. José Luiz, que é meu avô acadêmico e que me ensinou a gostar de fazer pesquisa. Eu nunca vou esquecer os anos que trabalhamos com modelagem numérica de escoamentos turbulentos e principalmente não me esquecerei de todas as palavras sábias que você me ensinou Zé. Admiro muito sua sabedoria e postura como Professor, engenheiro, amigo e pessoa. Você é o cara, velho! Obrigado também pelas sugestões sempre sábias com relação à correção do texto deste trabalho.

Agradeço também aos professores membros externos Hector Daniel Ceniceros da Universidade da Califórnia de Santa Bárbara e Paulo Cesar Philippi da Universidade

Federal de Santa Catarina, por terem se deslocado de suas respectivas Universidades e terem vindo até Brasília para assistir a minha defesa e darem contribuições importantes para melhorar o meu trabalho. Muito obrigado, Professores.

Faço um agradecimento especial a alguns seres, que não entendem da forma que nós entendemos as loucuras do mundo, mas que nos alegram todos os dias através da humildade e simplicidade de suas ações, são eles os animais de estimação que nos acompanham no dia a dia: os falecidos Bruce e Milena, Spike, Flicka com sua loucura habitual e a novata Fumacinha, o gato mais divertido do planeta que todos os dias me faz rir e enxergar a vida com mais tranquilidade e menos seriedade!

Finalmente agradeço aos funcionários e Professores do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Brasília e ao CNPq pelo apoio financeiro ao longo da execução desta tese e deixo aqui algumas letras de músicas, que para mim são pura sabedoria.

*O que que a ciência tem?
Tem lápis de calcular.
Que mais que a ciência tem?
Borracha para depois apagar...*

Raul Seixas - Todo mundo explica

*Coragem, coragem, se o que você quer
É aquilo que pensa e faz.
Coragem, coragem, que eu sei
Que você pode mais...*

Raul Seixas - Por quem os sinos doam

*I will instigate.
I will free your mind.
I will show you
What I know all this time...*

Slayer - Disciple

RESUMO

MICROMECAÂNICA E MICROHIDRODINÂMICA DE SUSPENSÕES MAGNÉTICAS.

Autor: Rafael Gabler Gontijo

Orientador: Prof. Francisco Ricardo da Cunha

Programa de Pós-graduação em Ciências Mecânicas

Brasília, outubro de 2013

A presente tese realiza uma investigação da hidrodinâmica de fluidos magnéticos, tanto do ponto de vista discreto, através de investigações numéricas acerca da mecânica de suspensões magnéticas, quanto do ponto de vista macroscópico, através de um estudo completo sobre as equações de balanço que modelam o comportamento de escoamentos de fluidos magnéticos.

No estudo relativo às equações de balanço da ferrohidrodinâmica um novo modelo matemático para a representação de escoamentos de fluidos magnéticos com tensor de tensões assimétrico é proposto. Um acoplamento completo entre o magnetismo e a hidrodinâmica para fluidos polares assimétricos é discutido em detalhes e um modelo fisicamente mais consistente é proposto. É ainda discutido como este novo modelo está relacionado à reologia de suspensões magnéticas.

A análise microestrutural de suspensões magnéticas traz uma proposta de um modelo matemático capaz de representar o movimento de partículas de um ferrofluido sujeitas à diversas forças, como brownianas, magnéticas devido à interações entre momentos de dipolo magnéticos de partículas e de um campo externo, forças de contato e forças repulsivas de lubrificação entre partículas e forças repulsivas associadas à representação de paredes físicas. Esta análise consiste inicialmente em um estudo baseado em um modelo de duas partículas com interações hidrodinâmicas para compreensão do comportamento de suspensões magnéticas diluídas, baseado em análises de trajetórias e posteriormente é feito um estudo envolvendo o problema de muitos corpos interagindo magneticamente, no qual é realizada uma análise numérica da estabilidade do código e posteriormente algumas propriedades de suspensões magnéticas são analisadas.

Por fim o efeito de interações hidrodinâmicas convergentes é considerado e é verificada a influência destas interações na física da suspensão. Novos modelos são propostos para a determinação da magnetização de equilíbrio da suspensão em função também de parâmetros associados à hidrodinâmica.

ABSTRACT

MICROMECHANICS AND MICROHYDRODYNAMICS OF MAGNETIC SUSPENSIONS.

Author: Rafael Gabler Gontijo

Supervisor: Prof. Francisco Ricardo da Cunha

Programa de Pós-graduação em Ciências Mecânicas

Brasília, october of 2013

This Thesis makes an investigation on the hydrodynamics of magnetic fluids. The study aims to analyse the microscopic and macroscopic behaviour of magnetic suspensions. The micromechanics analysis is based on direct numerical simulations on the particles scale. The macroscopic analysis consists in a complete study on the formulation of the ferrohydrodynamics balance equations.

In the study on the balance equations of the ferrohydrodynamics a new mathematical model for the representation of magnetic fluid flows with asymmetric stress tensor is proposed. It is shown that the complete coupling between magnetism and hydrodynamics for asymmetric polar fluids requires the use of an evolutive equation for the internal angular momentum of the particles that make up the magnetic suspension.

The microscopic analysis of magnetic suspensions consists in the proposal of a mathematical model capable of representing the motion of particles of a ferrofluid subjected to Brownian forces, forces due to magnetic interactions between magnetic dipole moments of particles (considering interactions particle-particle and particle-external magnetic field), contact forces between particles (for particles with higher inertia), repulsive forces between particles (lubrication), net gravitational forces and repulsive forces associated with the representation of the physical walls. This microscopic analysis is initially based on a study with a two-particle model considering hydrodynamic interactions to understand the behavior of dilute magnetic suspensions, based on a trajectory analysis.

Later it is studied the problem involving many body interacting magnetically, which is performed a numerical analysis stability of the code and then some properties of magnetic suspensions are analyzed, as the magnetization of a ferrofluid and analysis of variance of particle velocities as a function of volume fraction and the magnetic interaction parameter.

Finally hydrodynamic interactions are added to the many bodies problem and their effects on the physics of the suspension is discussed in details.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Fluidos Magnéticos: generalidades, características e aplicações	1
1.1.1	Características de Suspensões Magnéticas	6
1.1.2	Aplicações na indústria, biomedicina e nanotecnologia	11
1.2	Revisão bibliográfica Específica	15
1.2.1	Fechamento das equações da FHD para fluidos assimétricos	16
1.2.2	Problema de duas partículas	18
1.2.3	Problema de muitos corpos	23
1.3	Objetivos	28
1.4	Detalhamento dos objetivos	30
2	EQUAÇÕES DE BALANÇO PARA FLUIDOS MAGNÉTICOS	35
2.1	As equações de Maxwell	35
2.2	Limite Magnetostático de Maxwell	37
2.3	O Tensor de Maxwell	37
2.4	A equação do movimento para um fluido magnético	39
2.5	A equação da energia para um ferrofluido	40
2.6	A equação da entropia para um fluido magnético	42
2.7	O Potencial Magnético	43
2.8	Condições de Contorno para Campos Magnéticos	44
2.9	O problema da assimetria do tensor de tensões	45
2.9.1	Uma equação evolutiva para o momento angular	47
2.9.2	O efeito magnetoviscoso	49
2.10	Modelos de equações evolutivas atuais	53
2.11	Dedução de um novo modelo de magnetização baseado nas equações de Maxwell	55
2.12	Sumário das equações diferenciais que regem escoamentos de fluidos magnéticos	59
2.12.1	Adimensionalização do sistema de equações governantes da FHD	60

2.12.2	Uma proposta de um modelo completo de FHD para ser utilizado em CFD	63
3	ESTUDOS PRELIMINARES ENVOLVENDO A DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA	67
3.1	Suspensões coloidais magnéticas	67
3.2	Forças Brownianas	68
3.3	Formulação para a modelagem do movimento de uma partícula isolada	71
3.3.1	Trajетórias relativas típicas	73
3.3.2	Efeito da inércia da partícula em sua trajetória	75
3.3.3	Deslocamentos médios quadráticos	75
3.3.4	Efeito da inércia da partícula em sua velocidade média	77
3.3.5	Função autocorrelação de velocidades	77
3.3.6	Tempo de correlação	79
3.4	Uma breve discussão sobre as forças transientes atuantes em uma partícula isolada	80
4	PROBLEMA ENVOLVENDO DUAS PARTÍCULAS	83
4.1	Descrição matemática	83
4.1.1	Forças magnéticas	84
4.1.2	Construção dos tensores resistência para o problema de duas partículas esféricas bidispersas	89
4.2	Trajетórias relativas	94
4.3	Diagramas de reversibilidade - análise de diferentes posições iniciais . .	102
4.3.1	Efeito da configuração inicial de dipolos	104
4.3.2	Efeito da inércia rotacional	106
4.3.3	Bifurcações nos diagramas de reversibilidade	108
4.4	Frequência de trajetórias agregativas e difusivas	110
4.5	Anisotropia de deslocamentos de trajetórias difusivas	112
4.6	Influência do movimento Browniano nas trajetórias relativas	114
5	SISTEMAS COM MUITOS CORPOS - PARTE I	117
5.1	Formulação matemática para o problema de muitos corpos	117
5.2	Adimensionalização das equações governantes	119
5.3	Testes numéricos preliminares	121
5.3.1	Tempo de processamento	122
5.3.2	Flutuações de velocidade em suspensões magnéticas	123
5.3.3	Determinação da parte ativa da suspensão	126

5.3.4	Singularidades numéricas - formação de um dímero	130
5.3.5	Convergência de propriedades estatísticas em função do tamanho do sistema	134
5.4	Formação de cadeias e trajetória de uma partícula teste	137
5.5	Análise das flutuações de velocidade em suspensões magnéticas	149
5.6	Uma análise de modelos de magnetização	152
5.6.1	Magnetização em função de α	156
5.6.2	Magnetização em função de ϕ	158
5.6.3	Evolução da magnetização ao longo do tempo	159
5.6.4	Tempo de relaxação magnética	160
5.7	Comentários finais sobre este capítulo	162
6	SISTEMAS COM MUITOS CORPOS - PARTE II	164
6.1	Equações e teoremas fundamentais da Microhidrodinâmica	164
6.1.1	Linearidade das equações de Stokes, reversibilidade hidrodinâmica, problemas de mobilidade e resistência	165
6.1.2	A solução fundamental	166
6.2	Formulação matemática para o problema de muitos corpos com in- terações hidrodinâmicas	168
6.2.1	Interações hidrodinâmicas periódicas	171
6.2.2	Criação das células imagens	173
6.2.3	Mobilidades hidrodinâmicas de Beenakker	175
6.3	Formulação completa para sistemas particulados com interações magnéticas e interações hidrodinâmicas periódicas	177
6.3.1	Adimensionalização das equações para sistemas particulados com interações hidrodinâmicas e magnéticas	179
6.4	Resultados preliminares sem a presença de interações magnéticas ou campo externo aplicado	180
6.4.1	Divergência da velocidade média em sistemas não-periódicos	180
6.4.2	Convergência utilizando mobilidades periódicas	181
6.4.3	Influência do número de realizações e do número de lattices na velocidade média de sedimentação do sistema	182
6.4.4	Divergência da variância para um sistema apenas com interações hidrodinâmicas	186
6.4.5	Velocidade média de sedimentação	191
6.5	Influência das interações magnéticas no comportamento dinâmico do sistema particulado	195

6.5.1	Influência das interações magnéticas na velocidade média de sedimentação	195
6.5.2	Influência das interações magnéticas na variância do sistema . . .	201
6.5.3	Análise long-time das flutuações de velocidade	206
6.6	Magnetização de equilíbrio com interações hidrodinâmicas	215
6.7	Estabilização de leitos fluidizados magnéticos - um estudo de caso . . .	221
7	CONCLUSÕES	228
7.1	Principais resultados obtidos no presente trabalho	228
7.2	Temas a serem abordados em trabalhos futuros	231
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	233

Lista de Figuras

- 1.1 Partículas nanométricas de magnetita, Fe_3O_4 , com diâmetro médio de $9nm$ imersas em óleo mineral com uma fração volumétrica de partículas de aproximadamente 4%. Na figura é possível ver agregados do pó de magnetita na ausência de campo aplicado. A imagem foi obtida em um microscópio óptico da marca Olympus no Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia de Fluidos Complexos do Grupo Vortex na Universidade de Brasília por Nuno Dias e Francisco Ricardo Cunha. O pó foi sintetizado no instituto de Química da UFG. 2
- 1.2 Partículas nanométricas de magnetita, Fe_3O_4 , com diâmetro médio de $9nm$ imersas em óleo mineral com uma fração volumétrica de partículas de aproximadamente 4%. Na figura é possível ver longas cadeias do pó de magnetita na presença de um campo externo aplicado. A imagem foi obtida em um microscópio óptico da marca Olympus no Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia de Fluidos Complexos do Grupo Vortex na Universidade de Brasília por Nuno Dias e Francisco Ricardo Cunha. O pó foi sintetizado no instituto de Química da UFG. 2
- 1.3 Na Ferrohidrodinâmica o fluido possui um tensor de tensões modificado com a presença de tensões magnéticas. É possível visualizar uma geometria de *spikes* clássica de fluidos magnéticos concentrados na presença de um campo externo. As partículas da suspensão tendem a se alinhar com as linhas de indução magnética. Esta geometria típica está associada a um equilíbrio entre forças magnéticas na interface do fluido magnético com ar e forças de tensão superficial. A imagem acima foi obtida de um trabalho na área de arte e tecnologia da artista Sachiko Kodama. 4
- 1.4 Na Magnetohidrodinâmica (MHD) o fluido não é magnético, mas possui a capacidade de conduzir corrente elétrica, que na presença de campos magnéticos está sujeito a uma força extra de campo, denominada Força de Lorentz. 5
- 1.5 Partículas em um fluido magnético surfactado. 8
- 1.6 Detalhes dos surfactantes na superfície de uma partícula magnética . . . 8

1.7	Partículas em um fluido magnético iônico com fluido carreador básico. As esferas cinzas com cargas negativas ao redor representam as partículas magnéticas enquanto os sinais de positivo no interior do fluido base denotam íons livres no meio polarizado.	9
1.8	Fotografia obtida através de um vídeo feito no laboratório de Reologia e Microhidrodinâmica do Grupo Vortex - UnB. As figuras mostram a posição inicial (a) e final (b) de um par de esferas de plástico interagindo hidrodinamicamente. O encontro é forçado devido ao mecanismo de sedimentação diferencial, já que as esferas possuem diâmetros diferentes e massas específicas também diferentes. É possível notar uma ligeira quebra na reversibilidade da trajetória entre as esferas. A esfera com revestimento metálico que inicialmente se encontra em cima não retorna à mesma posição após o encontro. Essa quebra se deve devido à imperfeições geométricas na construção das esferas e a pequenos efeitos de rugosidade superficial. Neste caso específico o desvio em relação à posição inicial no plano perpendicular à gravidade equivale a 5% do diâmetro médio das esferas. O número de Reynolds típico do escoamento induzido nesse experimento é $Re \sim 10^4$	19
1.9	Ilustração do efeito das interações hidrodinâmicas na velocidade média de sedimentação de uma suspensão. Na figura (a) têm-se uma partícula isolada sem inércia sedimentando em um fluido viscoso em regimes de baixos números de Reynolds com a velocidade de Stokes. Já na figura (b) é possível notar que a velocidade de cada partícula é alterada em relação à velocidade de Stokes devido à influência das outras partículas que compõem a suspensão. É possível notar por exemplo que pode haver uma ou mais partículas se movimentando em sentido ascendente, contra a direção da gravidade devido à influência das outras.	26
1.10	Ilustração do efeito das interações hidrodinâmicas e magnéticas na velocidade média de sedimentação de uma suspensão. Na figura (a) considerando apenas interações hidrodinâmicas nota-se uma alteração na velocidade de cada partícula devido à influência das outras partículas, porém sem a quebra de randomicidade na distribuição espacial das partículas que compõem a suspensão. Já na figura (b), considerando interações magnéticas entre as partículas (sem um campo externo aplicado) é possível notar a formação de agregados irreversíveis que sedimentam mais rápido que as partículas isoladas não pertencentes a um agregado.	27

2.1	Condições de contorno na interface de dois materiais distintos. Em (a), a representação para a indução magnética e em (b), o esquema para o campo magnético (ilustração cedida por Sobral, Y. D., do original Sobral, 2002)	45
2.2	Partícula fluida sobre a ação de torques. Da cinemática de fluidos sabe-se que a velocidade angular da partícula fluida equivale à metade da vorticidade do escoamento no centro da partícula.	46
2.3	Reômetro com célula magnética utilizado na medição da viscosidade de um fluido magnético na presença de campo. (a) Disco rotativo, (b) cápsula de blindagem desmontada (c), detalhe do compartimento no qual é alojada a bobina do aparato magnetoreológico e (d) fonte de corrente elétrica utilizada para a geração de campo magnético controlável através de um eletroímã.	52
2.4	Contribuição da viscosidade rotacional comparada a de Einstein (1956) e Shliomis (1972) para um ferrofluido com $\phi = 0.009$ e α indo de 0 a 5. A linha cheia representa um ajuste de lei de potência, os pontos representam os valores experimentais para o efeito magnetoviscoso, a linha tracejada denota o aumento de viscosidade associado à correção ordem ϕ de Einstein e a linha traço-ponto representa a correção de Shliomis.	53
2.5	Ilustração do alinhamento dos momentos de dipolo das partículas através de um cisalhamento simples. Na figura é possível notar como o cisalhamento deforma microagregados, que através de interações magnéticas entre as partículas vizinhas após a deformação do microagregado altera os momentos de dipolo de cada partícula, em seguida a componente rotacional do cisalhamento altera ainda mais a configuração dos nanodipolos na microestrutura de uma suspensão magnética.	59
3.1	Trajetória browniana típica obtida através de simulação computacional feita por Gontijo (2010)	68
3.2	Trajetórias da partícula para diferentes números de Péclet	73
3.3	Função distribuição de probabilidade do deslocamento médio da partícula em uma determinada direção. Os pontos representam os valores numéricos obtidos em cima de várias realizações enquanto a linha cheia representa um ajuste gaussiano.	74
3.4	Trajetória de uma partícula em movimento browniano com $Pe=0.1$ para (a) $St=0$ e (b) $St=0.1$	75

3.5	Deslocamento médio quadrático para (a) $Pe=0.1$, (b) $Pe=1$, (c) $Pe=10$ e (d) ampliação do comportamento observado para $Pe=10$. A linha cheia denota a teoria de Einstein expressa pela equação (3.22), quadrados vazios denotam os valores numéricos obtidos em cima de várias realizações para deslocamentos em uma das direções perpendiculares à gravidade e o círculo preenchido denota os mesmos valores numéricos obtidos para a direção paralela à gravidade.	76
3.6	Relaxação da partícula com $St=0.1$ para condição de (a) $Pe=0.01$ e (b) $Pe=10$. A linha cheia representa a solução da equação diferencial do movimento de uma partícula com inércia sedimentando em um fluido viscoso em um escoamento com $Re \rightarrow 0$ na ausência de movimento Browniano, os quadrados vazios representam a solução numérica na direção paralela à da gravidade e os círculos preenchidos denotam a solução numérica em uma das direções perpendiculares à gravidade.	77
3.7	Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade para (a) $Pe=0.01$, (b) $Pe=0.1$, (c) $Pe=1$ e (d) $Pe=10$. O quadrado vazio denota uma das direções perpendiculares à da gravidade enquanto o círculo cheio representa a direção paralela à da gravidade. É possível observar que as flutuações de velocidade na direção paralela à da gravidade não se descorrelacionam com o tempo para maiores Péclets, indicando um comportamento determinístico destas, causado pela gravidade.	78
3.8	Tempo de correlação do sistema para (a) $Pe=0.01$, (b) $Pe=0.1$, (c) $Pe=1$ e (d) $Pe=10$. O quadrado vazio denota uma das direções perpendiculares à da gravidade enquanto o círculo cheio representa a direção paralela à da gravidade. É possível observar que o tempo de correlação na direção paralela à da gravidade não satura com o tempo para maiores Péclets, indicando um comportamento determinístico do sistema nesta direção, causado pela gravidade.	79
4.1	Esquema do problema de duas partículas	83
4.2	Forças magnéticas devido a aplicação de um campo magnético em um pequeno elemento magnetizado	85
4.3	Campo magnético devido a presença de um dipolo magnético	86
4.4	Interação entre dois momentos de dipolo magnéticos	87
4.5	Representação gráfica das possibilidades de configurações iniciais para os momentos de dipolo das partículas 1 e 2. A figura (a) representa a configuração 1 e a figura (b) a configuração 2	95
4.6	Simulação típica da sedimentação de duas partículas considerando a configuração 1, $St_R = 0.1$ e $\Psi_m = 100$. A posição inicial da partícula 1 foi definida como $X_1^{-\infty} = 1$, $Y_1^{-\infty} = 1$ e $Z_1^{-\infty} = -50$	96

4.7	Trajетórias relativas para $St_R = St = 0.1$ para diferentes valores de Ψ_m : 0 (linha cheia grossa), 10 (linha tracejada longa), 100 (linha tracejada curta) e 200 (linha pontilhada). A figura (a) mostra resultados para configuração 1 e a figura (b) para a configuração 2. A posição inicial da partícula 1 foi $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -50$	97
4.8	Trajетórias relativas difusivas (a) e agregativas (b)	98
4.9	Ângulo relativo entre as esferas para configuração 1, com $St = St_R = 0.1$ e $\Psi_m = 100$. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$	99
4.10	Velocidade relativa entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (a) e $\Psi_m = 100$ (c) e ângulo relativo entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (b) e $\Psi_m = 100$ (d), considerando a configuração 1. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$. A linha contínua representa $St_R = 0.1$ e linha tracejada $St_R = 1$	101
4.11	Velocidade relativa entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (a) e $\Psi_m = 100$ (c) e ângulo relativo entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (b) e $\Psi_m = 100$ (d), considerando a configuração 2. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$. A linha contínua representa $St_R = 0.1$ e linha tracejada $St_R = 1$	102
4.12	Diagramas de reversibilidade para trajетórias reversíveis (a) e irreversíveis (b).	104
4.13	Diagramas de reversibilidade para $St_R = 0.1$, configuração 1 na coluna da esquerda e configuração 2 na coluna da direita: (a) $\Psi_m = 10$, (b) $\Psi_m = 100$, (c) $\Psi_m = 200$, (d) $\Psi_m = 10$, (e) $\Psi_m = 100$, (f) $\Psi_m = 200$	105
4.14	Diagramas de reversibilidade para as configurações 1 (a) e 2 (b). $St_R = 1.0$ e $\Psi_m = 200$	108
4.15	Diagramas de reversibilidade para as configurações 1 (a) e 2 (b). $St_R \rightarrow \infty$ e $\Psi_m = 200$	108
4.16	Diagramas de reversibilidade para a configuração 2 e $St_R \rightarrow \infty$. (a) $\Psi_m = 0$, (b) $\Psi_m = 10$, (c) $\Psi_m = 100$, (d) $\Psi_m = 200$, (e) $\Psi_m = 300$ e (f) $\Psi_m = 400$	109
4.17	Frequência de trajетórias difusivas (a) e agregativas (b). Configuração de dipolos 1. $St_R = 0.1$ (quadrados), $St_R = 3.5$ (círculos) e $St_R \rightarrow \infty$ (triângulos)	111
4.18	Taxa de anisotropia entre os deslocamentos líquidos no plano zx e zy para a configuração 1, com $St_R = 0.1$. A linha pontilhada representa um fit linear	114

4.19	Trajetórias de uma partícula teste para $Pe \sim 1$, $\Psi_m = 200$ e $St = St_R = 0.1$. Problema de duas partículas (a) e problema de muitos corpos sem interações hidrodinâmicas com 500 partículas na suspensão para $\phi = 0.5\%$ (b) e $\phi = 15\%$ (c)	116
4.20	Trajetórias de uma partícula teste para $Pe \rightarrow \infty$, $\Psi_m = 200$ e $St = St_R = 0.1$. Problema de duas partículas (a) e problema de muitos corpos sem interações hidrodinâmicas com 500 partículas na suspensão para $\phi = 0.5\%$ (b) e $\phi = 15\%$ (c)	116
5.1	Forças de repulsão entre partículas (a) e entre partícula-parede (b) . . .	118
5.2	Forças de contato	119
5.3	Ganho de custo computacional através de programação paralela	122
5.4	Comportamento da variância ao longo do tempo para uma suspensão magnética	125
5.5	(a) Comportamento da variância ao longo do tempo para uma suspensão magnética, a linha tracejada denota a variância do sistema na direção da gravidade (eixo z), a linha contínua mais fina representa esta variável na direção x e a linha contínua mais grossa simboliza a variância na direção x. Na figura (b) é possível observar a evolução da quantidade de trómeros em cima de diversas realizações para o mesmo intervalo de tempo utilizado na confecção da figura (a).	125
5.6	Ilustração da parte ativa de uma suspensão	126
5.7	Aparato experimental para avaliar a frenagem de uma partícula devido à presença da parede - (a) box de vidro com óleo de silicone, (b) balança digital para medir a massa da esfera e (c) paquímetro digital para determinação do diâmetro da esfera	128
5.8	Relaxação e frenagem de uma partícula em um box físico. A figura (a) mostra a aceleração e frenagem de uma partícula devido à presença da parede inferior de um recipiente físico. A linha grossa denota o comportamento para $St = 10$, a linha tracejada para $St = 1$ e a linha contínua fina para $St = 0.1$. A figura (b) mostra ampliação do comportamento observado em (a) para a faixa final do movimento da partícula	128
5.9	Número médio de partículas na parte ativa da suspensão em função de D	129
5.10	Variância da parte ativa da suspensão em função de D	130
5.11	Esquema utilizado para a calibração da distância mínima entre centros na qual a força magnética deve ser desligada. Os dipolos das partículas são setados como idênticos e estão alinhados na direção de separação das esferas, o que gera uma força líquida de atração entre estas.	131

5.12	Distância mínima entre centros na qual a força magnética deve ser desligada em função de ψ_m	132
5.13	Comportamento da distância entre centros com relação ao tempo. (a) Força magnética sempre ligada, (b) força magnética desligada para distância entre centros igual a $2a$, (c) ampliação do comportamento observado em (b) e (d) força magnética desligada em uma distância calibrada corretamente	133
5.14	Velocidade média de uma suspensão magnética em função do tempo. A linha contínua denota a variação de uma das componentes perpendiculares à gravidade e a linha tracejada representa a componente de velocidade na direção da gravidade. O encarte representa uma ampliação do comportamento observado na direção perpendicular à gravidade.	135
5.15	Variância em função do tamanho do sistema para (a) $\phi = 0.1\%$ e (b) $\phi = 1.0\%$. É possível notar que em ambos os casos as interações magnéticas que decaem com $1/r^4$ levam a uma estatística convergente para a variância do sistema particulado.	136
5.16	Magnetização de equilíbrio em função do tamanho do sistema - $\phi = 5.0\%$. É possível observar uma rápida convergência desta propriedade em função do tamanho do sistema para a condição de $\alpha^* = \alpha = 10$ e $Pe = 1$. Estudos mais detalhados em relação à convergência desta propriedade para valores menores de campo aplicado ($\alpha \sim 1$, que leva a um comportamento menos determinístico do sistema) serão feitos em seções futuras.	136
5.17	Trajetória de uma partícula teste em diferentes situações físicas. A figura (a) ilustra uma suspensão sem interações magnéticas sujeita apenas a ação da gravidade no limite em que $Pe \rightarrow \infty$, $\varphi_m = 0$. Já a figura (b) mostra a trajetória de uma partícula teste em uma suspensão sujeita apenas à ação da gravidade e interações magnéticas com $Pe \rightarrow \infty$ e $\psi_m = 20$. A letra (c) ilustra a trajetória de uma partícula teste em uma suspensão sem interações magnéticas, com movimento Browniano para valores de $Pe = 1$ e a figura (d) considera interações magnéticas e movimento browniano com $\alpha^* = 20$ e $Pe = 1$	137
5.18	Evolução temporal do processo de formação de agregados em uma suspensão não-coloidal com interações magnéticas na ausência de um campo aplicado. A figura (a) mostra o instante inicial $t=0$, em (b) têm-se a imagem obtida para $t=40$ tempos de Stokes, em (c) e (d) têm-se a mesma configuração das figuras (a) e (b), porém com uma ampliação no centro do domínio de cálculo da suspensão.	139

5.19	Evolução temporal do processo de formação de agregados em uma suspensão não-coloidal com interações magnéticas na presença de um campo aplicado. A figura (a) mostra o instante inicial $t=0$, em (b) têm-se a imagem obtida para $t=40$ tempos de Stokes. Em (c) é dado um detalhe da configuração inicial através de uma ampliação do centro da suspensão e em (d) é mostrado o mesmo detalhe, porém para $t=40$. É possível notar a formação de agregados alinhados na direção do campo aplicado, neste caso o eixo z	140
5.20	Configuração da posição das partículas e dos momentos de dipolo destas na condição de um campo externo aplicado para $St = 0.1$, $\psi_m = \varphi_m = 10$, $\phi = 5.0\%$ e $Pe \rightarrow \infty$. A figura (a) mostra a configuração das partículas no instante inicial enquanto a figura (c) ilustra apenas as configurações dos momentos de dipolo no mesmo instante. Já a figura (b) ilustra a configuração das esferas no instante de tempo $t = 4$ tempos de Stokes e a figura (d) é obtida para o mesmo instante, porém mostra apenas a direção dos momentos de dipolo das esferas.	141
5.21	Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo.	142
5.22	Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo e encontram-se alinhadas sobre uma linha perpendicular ao eixo y	144
5.23	Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo e encontram-se alinhadas sobre uma linha perpendicular ao eixo x	145
5.24	Formação de um agregado em uma simulação na presença de interações magnéticas entre as partículas, na ausência de um campo externo. A figura (a) ilustra uma ampliação no interior da suspensão em um agregado qualquer enquanto a figura (b) mostra apenas as setas indicando o momento de dipolo de cada partícula pertencente ao agregado ilustrado na figura (a).	146
5.25	Formação de um agregado em uma simulação na presença de interações magnéticas entre as partículas com um campo externo aplicado. A figura (a) ilustra uma ampliação no interior da suspensão em um agregado qualquer enquanto a figura (b) mostra apenas as setas indicando o momento de dipolo de cada partícula pertencente ao agregado ilustrado na figura (a).	146

5.26	Esquema comparativo entre o raio de giração de um agregado com seis partículas agrupadas numa configuração na ausência de campo externo (a) e na presença deste (b).	147
5.27	Variância em função de ϕ para $\psi_m = 20$	150
5.28	Variância em função de ψ_m para $\phi = 5\%$	151
5.29	Momentos de dipolo distribuídos randomicamente (a) e momentos de dipolo alinhados na direção de um campo externo (b)	152
5.30	Correção dos modelos apresentados. A linha tracejada representa o modelo de Jansons (1983) enquanto a linha traço-ponto denota o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ e a linha contínua o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ ambos de Ivanov e Kuznetsova (2001). Nas figuras (a) $\phi = 1\%$ e (b) $\phi = 10\%$	155
5.31	Magnetização de equilíbrio em função de α para $\phi = 5.0\%$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, os quadrados vazios representam o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov et al. (2001) e a linha tracejada o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos através da metodologia proposta no presente trabalho. As barras de erro representam o desvio padrão em cima de várias realizações. O encarte mostra um detalhe na comparação entre os valores dos modelos e o valor numérico para $3 < \alpha < 27$	157
5.32	Magnetização de equilíbrio em função de ϕ para $\alpha = 3$ (a) e para $\alpha = 10$. A linha contínua representa o modelo clássico de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$, a linha tracejada o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov et al. (2001) e o círculo preenchido os valores numéricos utilizando a presente metodologia.	158
5.33	Magnetização de equilíbrio em função do tempo para diferentes Péclets. Na figura (a) a linha contínua denota $Pe = 0.1$, o quadrado vazio $Pe = 1$ e o círculo preenchido em preto $Pe = 5$. Para a figura (b) a linha pontilhada representa $Pe = 10$, a linha grossa contínua $Pe = 50$ e a linha tracejada $Pe = 100$	160
5.34	Evolução temporal para determinação da magnetização de equilíbrio da suspensão - $Pe = 1$, $\phi = 5.0\%$, $St = 0.1$, $\alpha = \alpha^* = 5$	161
5.35	Ajuste da evolução temporal da magnetização da suspensão para valores de equilíbrio. A linha tracejada representa o ajuste exponencial e a linha contínua os valores numéricos. Em ambas as figuras têm-se $\phi = 5.0\%$, $St = 0.1$ e $\alpha = \alpha^* = 5$. A figura (a) foi obtida para $Pe = 0.1$ e a figura (b) para $Pe = 1.0$	162

6.1	Exemplo de um sistema particulado com condições de contorno periódicas. Neste caso a célula central possui apenas 20 partículas com $\phi = 0.15$. Existem 125 células replicadas periodicamente na figura, totalizando 2500 partículas.	173
6.2	Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas (a) e da fração volumétrica de partículas (b) para um sistema não periódico com interações hidrodinâmicas simples utilizando o tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969)	181
6.3	Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas para uma fração volumétrica $\phi = 0.05$. Os valores numéricos são comparados com a teoria assintótica de Batchelor (1972) e com as correlações empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988)	182
6.4	Variação da velocidade média da suspensão em função do número de realizações (a) e custo computacional (b)	183
6.5	Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas utilizando 27 boxes e 125 boxes (a) e custo computacional em função do número de partículas para 27 e 125 boxes (b)	183
6.6	Exemplo de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$	185
6.7	Exemplo de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$ vista de lado, no qual é possível notar a periodicidade da estrutura	186
6.8	Ampliação no interior de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$	187
6.9	Geração de condições iniciais em laboratório com ligeiros desvios de uma condição totalmente randômica. Neste caso o déficit de partículas em determinado lado do recipiente induz o surgimento de correntes convectivas na suspensão, que podem induzir flutuações extras de velocidade maiores que àquelas flutuações estatísticas induzidas apenas por interações hidrodinâmicas levando a um comportamento em laboratório convergente da variância do sistema.	189
6.10	Divergência da variância com o tamanho do sistema para uma suspensão com fração volumétrica de partículas igual a $\phi = 0.05$	190

6.11	Ilustração esquemática do efeito backflow e do surgimento de correntes convectivas no interior de uma suspensão devido às interações entre as partículas	191
6.12	Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas	193
6.13	Distribuição espacial de partículas para um arranjo ordenado com 125 lattices e 27 partículas em cada lattice	193
6.14	Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas para um arranjo ordenado com 125 lattices e 27 partículas em cada lattice	194
6.15	Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas com $\psi_m = 0$ (a) e $\psi_m = 50$ (b)	196
6.16	Evolução típica da microestrutura de uma suspensão de partículas rígidas monodispersa com $\phi = 0.03$, no limite de $Pe \rightarrow \infty$, na ausência de interações magnéticas. Instante inicial (a), $t = 50a/U_s$ (b), $t = 100a/U_s$ (c) e $t = 200a/U_s$ (d)	197
6.17	Evolução típica da microestrutura de uma suspensão de partículas rígidas monodispersa com $\phi = 0.03$, no limite de $Pe \rightarrow \infty$, na presença de interações magnéticas sem campo externo e com $\psi_m = 50$. Instante inicial (a), $t = 50a/U_s$ (b), $t = 100a/U_s$ (c) e $t = 200a/U_s$ (d)	198
6.18	Variação da velocidade média de sedimentação em função da fração volumétrica de partículas na presença de interações magnéticas. A linha contínua mais grossa denota a correlação empírica de Richardson-Zaki (1954), a linha tracejada corresponde à correlação de Brady-Durlofsky (1988), a linha traço-ponto representa a teoria assintótica de Batchelor (1972), os valores numéricos são dados para o caso sem interações magnéticas (círculos preenchidos) e para interações magnéticas com $\psi_m = 50$ (asterisco)	199
6.19	Análise de convergência da variância do sistema para $\psi_m = 0$ (a), $\psi_m = 1$ (b), $\psi_m = 10$ (c) e $\psi_m = 100$ (d)	202
6.20	Análise de convergência da variância do sistema para $\psi_m = 120$ (a), $\psi_m = 140$ (b), $\psi_m = 160$ (c) e $\psi_m = 180$ (d)	204
6.21	Variância do sistema na direção paralela à gravidade em função de ψ_m para $\phi = 0.05$ com 2000 partículas na lattice central em um reticulado com 125 lattices	205

6.22	Variância do sistema na direção paralela à gravidade em função de ϕ para $\psi_m = 100$ com 2000 partículas na lattice central em um reticulado com 125 lattices	206
6.23	Tempo de correlação das flutuações de velocidade sem interações magnéticas	207
6.24	Tempo de correlação das flutuações de velocidade com interações magnéticas	208
6.25	Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade na direção perpendicular à gravidade na presença de interações magnéticas	209
6.26	Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade na direção paralela à gravidade na presença de interações magnéticas	210
6.27	Estruturas típicas formadas no interior da suspensão após uma longa evolução temporal de $200a/U_s$, para uma fração volumétrica $\phi = 0.03$ considerando diferentes intensidades de ψ_m	211
6.28	Variação do tempo de correlação do sistema na presença de interações magnéticas em função de α^* para as três direções do espaço	213
6.29	Fit com decaimento exponencial da função autocorrelação para $\psi_m = 0$	213
6.30	Fit com decaimento exponencial da função autocorrelação para $\psi_m = 20$	214
6.31	Desenho esquemático de como o escoamento influencia a magnetização da suspensão	215
6.32	Convergência da magnetização de equilíbrio da suspensão considerando agora a presença de interações hidrodinâmicas e magnéticas. O gráfico mostra a variação dos valores médios de magnetização em função do número de partículas para $\phi = 0.01$, 10 realizações simultâneas, $\alpha = \alpha^* = 1$ e $Pe = 0.4$	217
6.33	Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de α para $\phi = 0.01$ (a) e $\phi = 0.15$ (b).	218
6.34	Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de ϕ para $\alpha = 1$ (a) e $\alpha = 10$ (b). A linha contínua denota o modelo de Langevin, a linha pontilhada a solução $O(\phi^3)$ de Ivanov et al. (2001) e os círculos preenchidos representam os valores numéricos para $Pe \rightarrow 0$	218
6.35	Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de Pe para $\alpha = \alpha^* = 1$ e $\phi = 0.01$	221

6.36	Esquema de um modelo de leito fluidizado magnético em uma suspensão magnética fracionada. O campo externo é aplicado na direção de fluidização. As partículas esféricas com contorno traço-ponto denotam partículas não magnéticas enquanto as esferas com contorno contínuo representa as partículas magnéticas e as setas em cima de cada partícula magnética denotam a orientação do momento de dipolo da respectiva partícula.	224
6.37	Decaimento das flutuações transversais de velocidade devido à adição de partículas magnéticas em um leito fluidizado na presença de um campo magnético.	225
6.38	Microestrutura para $\phi_m = 0$ e $\phi_m = 0.4$	226
1	Esquema para o caso 2	245
2	Duas partículas bidispersas	249

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros físicos necessários para a formulação completa de escoamentos de fluidos magnéticos assimétricos	62
2.2	Regimes de escoamentos de fluidos magnéticos em função dos parâmetros físicos do problema	63
4.1	Funções utilizadas no cálculo das funções resistência X_{11}^A e X_{12}^A	92
4.2	Funções utilizadas no cálculo das funções resistência Y_{11}^A e Y_{12}^A	93
5.1	Diferença percentual para $\alpha = 2.8$ entre as correções $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) para diferentes valores de ϕ	156

LISTA DE SÍMBOLOS

∇	Operador gradiente
$\nabla \cdot$	Operador divergente
$\nabla \times$	Operador rotacional
∇^2	Operador Laplaciano
$\nabla \mathbf{d}_i$	Operador gradiente com base em derivadas do momento de dipolo \mathbf{d}_i
$\frac{\partial}{\partial t}$	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
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor de tensões do meio
$\boldsymbol{\sigma}_h$	Tensor de tensões hidrodinâmico
$\boldsymbol{\sigma}_m$	Tensor de tensões magnético
χ	Suceptibilidade magnética
MHD	Magnetohidrodinâmica
FHD	Ferrohidrodinâmica
\mathbf{B}	Indução magnética
\mathbf{E}	Campo Elétrico
\mathbf{H}	Campo magnético
\mathbf{J}	Densidade de corrente elétrica
\mathbf{M}	Magnetização
\mathbf{u}	Campo de velocidade
\mathbf{I}	Tensor identidade
\mathbf{D}	Tensor taxa de deformação
\mathbf{W}	Tensor taxa de rotação
\mathbf{M}_{ij} ou $M_{ij}^{\alpha,\beta}$	Matriz mobilidade
\mathbf{R}_{ij}	Matriz resistência
\mathbf{g}	Aceleração da gravidade

\mathbf{x}	Vetor posição espacial
p	Pressão
p_m	Pressão magnética
\mathcal{P}	Pressão mecânica
$\boldsymbol{\sigma}^d$	Parte deviatória do tensor de tensões
E_c	Energia cinética
E_i	Energia interna
E_T	Energia total
e	Energia interna específica
s	Entropia específica
\mathbf{q}''	Fluxo de calor
α	Difusividade térmica do fluido
$\dot{\varepsilon}$	Taxa de geração de energia interna
\mathbf{L}	Momento angular
\mathbf{t}	Vetor de tensões
\mathcal{D}	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
κ_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura
U_s	Velocidade de Stokes
ϕ	Fracção volumétrica de partículas
ϕ_m	Fracção volumétrica de partículas magnéticas
Φ_m	Potencial magnético
Λ, \mathcal{Y} e Υ	Parâmetros de calibração de forças repulsivas
ℓ	Escala típica de comprimento
\mathbf{k}	Vetor número de onda
r	Distância entre os centros das esferas
a	Raio de uma esfera
ϵ_{ij}	Distância entre as superfícies de duas esferas i e j

Capítulo 1 INTRODUÇÃO

1.1 Fluidos Magnéticos: generalidades, características e aplicações

Na Mecânica dos Fluidos nos referimos à uma suspensão magnética um material composto pela adição de pequenas partículas de material magnético em um fluido base. Quando nos referimos à um *ferrofluido* ou utilizamos simplesmente a palavra *fluido magnético*, estamos falando de uma classe especial de suspensões magnéticas nas quais o diâmetro médio das partículas que compõem a suspensão é da ordem de nanômetros. Este tipo de suspensão é chamada de suspensão coloidal ou simplesmente colóide. O que diferencia uma suspensão coloidal de uma suspensão com partículas de tamanhos maiores é justamente a sensibilidade que as partículas possuem aos efeitos de agitação molecular das moléculas do fluido base por efeito térmico.

Em um fluido magnético típico as partículas possuem um diâmetro médio de aproximadamente $10nm$ e são dispersas em um fluido base apropriado. Os fluidos base geralmente utilizados na confecção de fluidos magnéticos são óleos sintéticos, éster ou água. O movimento das partículas que compõem um fluido magnético é regido por um conjunto de forças que atua na escala da partícula e que irão determinar a estabilidade da suspensão. Na física de colóides diversas forças atuam nas pequenas partículas. As principais são: forças Brownianas, forças atrativas de van-der Waals, forças de repulsão eletrostática por desbalanceamento de cargas elétricas na superfície das partículas em contato e no caso de suspensões magnéticas a própria força magnética devido à interação entre os momentos de dipolo das partículas e devido à possível aplicação de um campo magnético externo. Uma fluido magnético para aplicação prática deve ser estável com relação à tendência de formação de agregados devido à forças atrativas atuantes na escala da partícula, para este propósito geralmente são adicionadas macromoléculas às superfícies das partículas que agem como nano molas repulsoras inibindo a formação de agregados. Estas macromoléculas são denominadas surfactantes e estão presentes nos chamados fluidos magnéticos surfactados. Um outro tipo de fluido magnético que utiliza um mecanismo diferente de repulsão é denominado *fluido magnético iônico*, estes serão discutidos na seção subsequente.

Diversas características diferenciam fluidos magnéticos de outras classes de fluidos,

Este alinhamento das partículas na direção de um campo externo gera uma consequência muito interessante, que é o aumento da viscosidade efetiva do fluido, devido ao esforço extra que um carregamento cisalhante aplicado ao fluido deve fazer para desorientar estas partículas e fazer com que estas girem na direção da vorticidade do escoamento. Desta forma é possível através da aplicação de campos externos controlar a viscosidade de um fluido magnético em escoamento. Este controle abre as portas para diversos novos tipos de aplicação como por exemplo a diminuição de arrasto para escoamentos internos no interior de dutos (Cunha et al. - 2004).

A maioria das aplicações da Mecânica dos Fluidos foi sempre mais restrita a escoamentos de fluidos em que campos magnéticos estão ausentes. No entanto, a combinação de campos magnéticos e fluidos polares tem atraído, mais recentemente, profissionais das áreas de física, química, engenharia e da área da biomedicina. A razão principal reside no fácil controle e monitoramento de sistemas contendo fluidos ou partículas magnéticas, pela resposta rápida desses fluidos quando sujeitos à ação de um campo magnético. O controle do comportamento de escoamentos de fluidos magnéticos através da aplicação de um campo externo deu origem a várias outras possibilidades de aplicação e novos experimentos em mecânica e hidrodinâmica dos fluidos, que levaram ao desenvolvimento de novas técnicas e aplicações tecnológicas e biomédicas. Uma revisão bibliográfica extensa será feita nas seções seguintes a fim de discutir as diversas possibilidades de aplicações referentes a fluidos magnéticos.

Uma outra classe interessante de suspensões magnéticas consiste nas *suspensões magneto-reológicas*. O principal fator que diferencia um *fluido magnético* ou *ferrofluido* de uma *suspensão magneto reológica* é o diâmetro das partículas utilizadas na síntese do fluido. Enquanto um ferrofluido é composto de partículas de tamanho nanométrico, uma suspensão magneto reológica, doravante denominada **S.M.R.**, é feita com partículas de tamanho micrométrico e portanto não estão sujeitas ao movimento Browniano induzido por agitação térmica molecular. Esta nova classe de suspensões magnéticas possui características diferentes dos ferrofluidos, entre elas pode-se citar: maior instabilidade com relação à formação de agregados e maior *memória* magnética. Estas duas características são uma consequência direta da diminuição dos valores do coeficiente de difusão Browniana de Stokes-Einstein \mathcal{D} , devido ao aumento do tamanho das partículas, já que este é definido como

$$\mathcal{D} = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}, \quad (1.1)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura do fluido base, η a viscosidade do fluido e a o raio médio das partículas.

Um dos fatores que determina a estabilidade da suspensão é justamente à sensibilidade ao movimento Browniano por parte das partículas, pois este atua na tentativa de randomizar a distribuição espacial, desta forma uma diminuição na intensidade do coeficiente de difusão Browniano leva a uma predominância das forças atrativas atuantes na escala das partículas em relação à tendência de randomização da posição destas devido à agitação térmica das moléculas do fluido base.

A área da Mecânica dos Fluidos que estuda o movimento de fluidos magnéticos sob ação de forças magnéticas produzidas por gradiente de campos magnéticos é denominada ferrohodinâmica (Rosensweig, 1985). Descrições de escoamentos de fluidos magnéticos com base na Ferrohodinâmica, geralmente, não consideram ação de campos elétricos e correntes elétricas, resultando num acoplamento das equações de Maxwell em regime magneto-estático com as equações da hidrodinâmica dos fluidos. É importante ressaltar a diferença entre a área relativamente bem conhecida da mecânica dos fluidos chamada magnetohodinâmica (MHD) e ferrohodinâmica (FHD). Em magnetohodinâmica a força magnética atuando sobre as partículas fluidas é a força de Lorentz por unidade de volume ($\mathbf{J} \times \mathbf{B}$), resultante da passagem de uma corrente elétrica em fluido condutor não necessariamente magnético (metais líquidos, plasma), em que \mathbf{J} é a densidade de corrente elétrica e \mathbf{B} o vetor indução magnética. As figuras (1.3) e (1.4) mostram a diferença entre FHD e MHD.

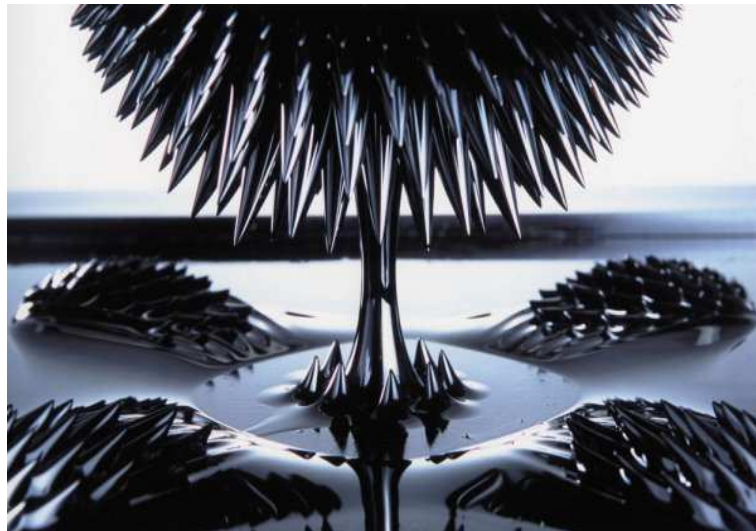


Figura 1.3: Na Ferrohodinâmica o fluido possui um tensor de tensões modificado com a presença de tensões magnéticas. É possível visualizar uma geometria de *spikes* clássica de fluidos magnéticos concentrados na presença de um campo externo. As partículas da suspensão tendem a se alinhar com as linhas de indução magnética. Esta geometria típica está associada a um equilíbrio entre forças magnéticas na interface do fluido magnético com ar e forças de tensão superficial. A imagem acima foi obtida de um trabalho na área de arte e tecnologia da artista Sachiko Kodama.

Como exemplo da importância do comportamento microestrutural e sua influência no movimento macroscópico de fluidos magnéticos considere a forma matemática através do qual modelamos as forças magnéticas que atuam no interior de um ferrofluido escoando na presença de um campo externo. Sabemos hoje em dia que o acoplamento entre a hidrodinâmica e o magnetismo está associado a uma força magnética que depende do gradiente de campo e da magnetização do fluido. A magnetização de um fluido magnético por sua vez é uma das principais propriedades de caracterização deste tipo de fluido. Seu valor em cada ponto do espaço de um escoamento está diretamente associado à intensidade da força a qual o fluido contínuo equivalente está sujeito.

Por definição a magnetização de um fluido magnético em um ponto material nada mais é do que uma média do alinhamento dos momentos de dipolo de cada partícula presente em um volume do contínuo na direção de um campo aplicado. Porém a direção do momento de dipolo de uma determinada partícula inserida no meio de uma suspensão depende de uma combinação de forças e torques atuantes em cima desta, principalmente das forças e torques Brownianos e magnéticos, sendo os últimos dependentes da configuração da suspensão, pois estão associadas à interações entre todas as partículas da suspensão. Desta forma evidencia-se a impossibilidade da dissociação do comportamento microestrutural do material de sua dinâmica macroscópica observável em escalas maiores.

Através de estudos numéricos-teóricos o presente trabalho aborda com profundidade a modelagem da dinâmica de sistemas particulados na presença de interações magnéticas e procura trazer sempre o *link* entre microestrutura e comportamento macroscópico através da determinação de propriedades de transporte destas suspensões.

1.1.1 Características de Suspensões Magnéticas

Um fluido magnético coloidal consiste em um conjunto de partículas de ferrita ou maguemita em escalas nanométricas disperso em um fluido carreador apropriado. A estabilização contra a formação de agregados irreversíveis na suspensão é obtida pela presença de cargas elétricas ou tensoativos na superfície das partículas que geram forças repulsivas de curta distância, evitando a formação de pares. Um fluido magnético típico contém cerca de 10^{23} partículas por metro cúbico e é opaco à luz visível.

É desejável que um fluido magnético seja uma suspensão estável. Basicamente, o

fluido deve possuir partículas suficientemente pequenas de tal modo que as mesmas fiquem suspensas no líquido carreador por meio da agitação molecular devido à temperatura do fluido base. Essa agitação deve ser caracterizada por escalas de tempo menores do que o tempo típico de interação magnética de pares por forças magnéticas atrativas (interação dipolar), de modo a evitar a aglomeração de partículas. Outra condição para garantir a estabilidade, é o fato de que as partículas magnéticas devem incorporar forças de repulsão superficial de curto alcance que previna a aglomeração por meio de forças atrativas do tipo Van der Waals (Bakuzis, 1996).

Existem basicamente dois tipos de fluidos magnéticos (ferrofluidos coloidais): os surfactados e os iônicos (Bakuzis, 1996). Esta divisão se baseia no mecanismo de repulsão entre partículas, que, como dito, é uma condição para garantir a estabilidade do fluido magnético e manter sua configuração estrutural randômica e isotrópica por um longo período de tempo. Os surfactados são fluidos magnéticos comerciais e são as primeiras suspensões ultra-estáveis produzidas sinteticamente. São também os mais conhecidos e apresentam maiores aplicações em termos de engenharia. O mecanismo que inibe a aglomeração de partículas se baseia em revestir a própria partícula com cadeias poliméricas apolares conhecidas como surfactantes ou tensoativos. A espessura típica de uma camada surfactante é da ordem de 2-3 nm. Com esse tipo de revestimento é possível produzir suspensões magnéticas estáveis em óleo, água e querosene.

A figura (1.5) mostra um esquema deste tipo de fluido magnético, enquanto a figura (1.6) mostra o detalhe de uma única partícula na presença de surfactantes em sua superfície, de um modo geral a ordem e magnitude dos diâmetros das partículas é de 10nm, enquanto os comprimentos médios das cadeias de macromoléculas inseridas na superfície das partículas está em torno de 2 – 3nm.

Tipo menos comuns de fluido magnético, os fluidos magnéticos iônicos apresentam características interessantes uma vez que são usados em meios carregados de íons. O mecanismo de repulsão das partículas é diferente dos fluidos magnéticos surfactados, uma vez que a camada estabilizante agora é polarizada. Todas as partículas possuem uma camada de íons com a mesma polaridade de modo que a repulsão eletrostática evita a floculação da suspensão e possível decantação do material. As cargas em torno das partículas serão positivas se o líquido carreador for um meio ácido ($\text{pH} < 7$) e serão negativas se o carreador for um meio básico ($\text{pH} > 7$). A figura 1.7 apresenta um esquema deste tipo de fluido magnético com fluido carreador básico.

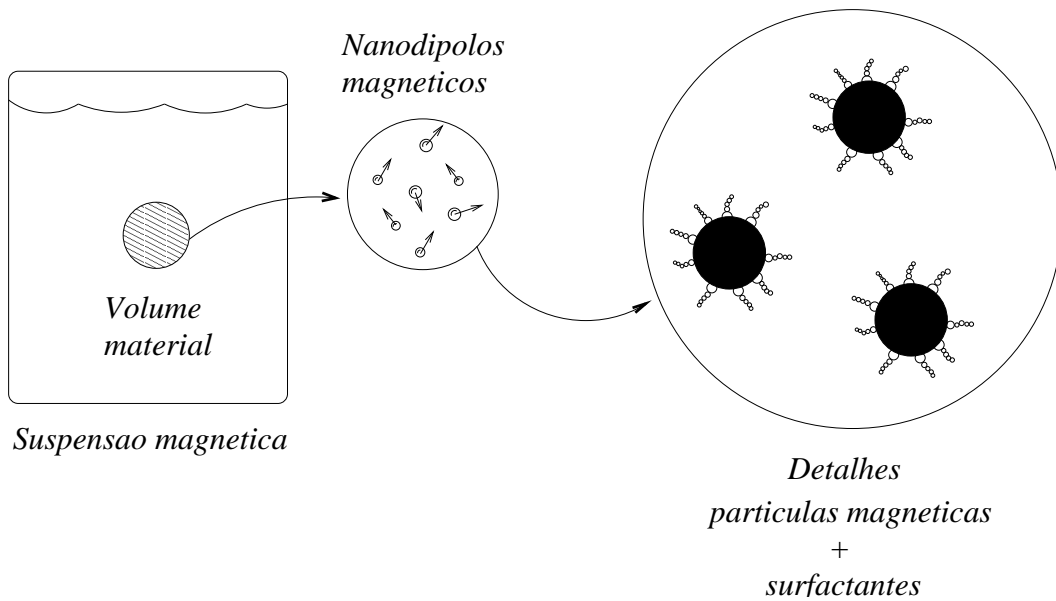


Figura 1.5: Partículas em um fluido magnético surfactado.

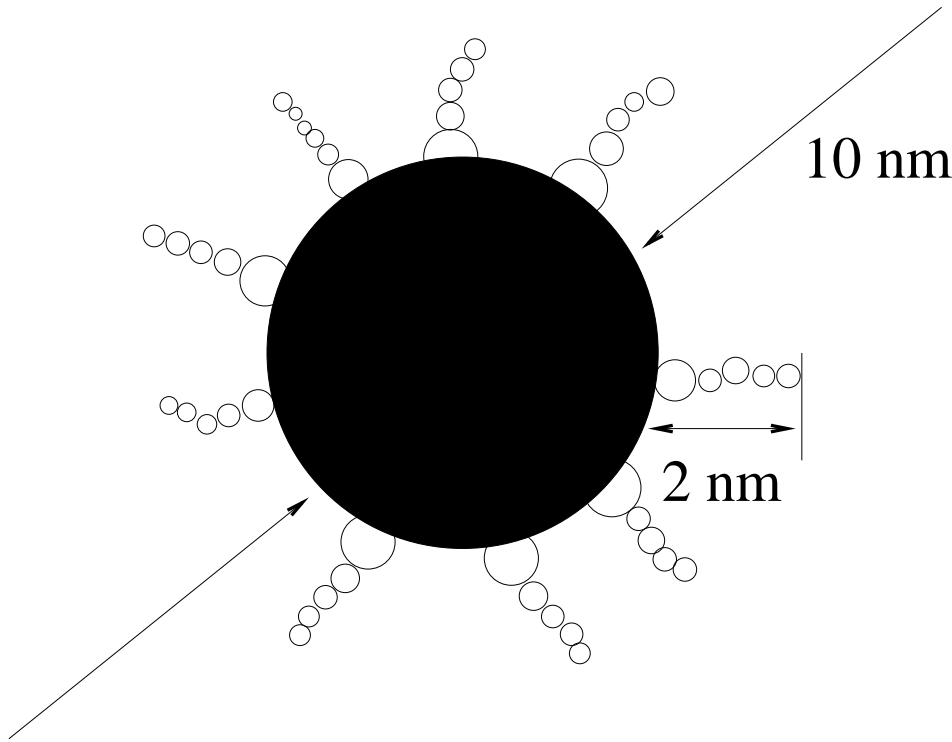


Figura 1.6: Detalhes dos surfactantes na superfície de uma partícula magnética

Anteriormente mencionou-se que um ferrofluido é mantido estável devido ao fato do movimento browniano estar continuamente randomizando a suspensão e evitando a formação de agregados por interação magnética, além do uso de surfactantes para que forças repulsivas possam ser geradas e evitar possíveis agregações. Do ponto de vista físico, a estabilidade de um ferrofluido é mantida por uma condição em que a energia térmica associada ao movimento browniano é maior ou igual à energia magnética que

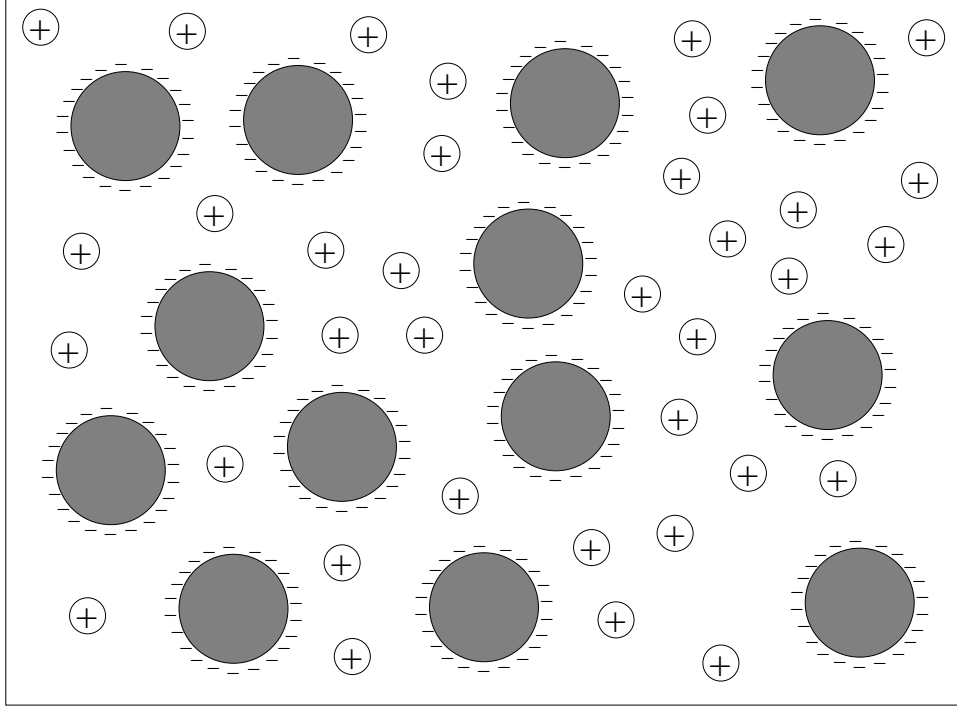


Figura 1.7: Partículas em um fluido magnético iônico com fluido carreador básico. As esferas cinzas com cargas negativas ao redor representam as partículas magnéticas enquanto os sinais de positivo no interior do fluido base denotam íons livres no meio polarizado.

por sua vez pode dar origem à forças atrativas na micro-estrutura do material, em termos matemáticos esta relação é expressa por Rosensweig (1985) como:

$$\frac{\text{Energia térmica}}{\text{Energia magnética}} = \frac{k_B T}{\mu_0 M H V} \geq 1, \quad (1.2)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura do fluido, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, M representa a magnetização do material que constitui as partículas, H é a intensidade do campo magnético externo aplicado e V denota o volume da nano-partícula. Para partículas esféricas, têm-se que o diâmetro máximo de partícula que mantém esta condição de estabilidade é dado por

$$d \leq \left(\frac{6k_B T}{\pi \mu_0 M H} \right)^{1/3}, \quad (1.3)$$

da equação (1.3) considerando um ferrofluido contendo partículas de magnetita (Fe_3O_4) sujeitas a um campo magnético típico de um ímã permanente de $H = 8 \times 10^4 A.m^{-1}$, com $M = 4,46 \times 10^5 A.m^{-1}$ a uma temperatura de $298K$, esta condição de estabilidade é mantida para partículas com diâmetros inferiores a $8,1 \times 10^{-9}m$. Esta análise de parâmetros mostra porque as partículas devem ser tão pequenas a fim de que se mantenha a estabilidade de uma suspensão magnética.

É importante frisar que as partículas devem ser pequenas a fim de se garantir a estabilidade da suspensão não apenas devido à tendências agregativas oriundas de forças magnéticas e de van der Waals que devem ser compensadas pelo efeito de agitação térmica das moléculas do fluido base que inibem a formação de agregados graças à constante tentativa de randomização da distribuição espacial das partículas que compõem a suspensão, mas também devido à tendência de sedimentação diferencial destas no fluido base. Geralmente as partículas sólidas que compõem suspensões magnéticas costumam ser mais densas que o fluido base. Esta diferença de massa específica faz com que as partículas sedimentem e após um tempo suficientemente longo a suspensão na verdade passaria a possuir apenas um *corpo de fundo* sólido e um fluido base não magnético.

Conforme será mostrado em seções futuras, mesmo que uma partícula mais densa seja inserida em um fluido base, esta pode não sedimentar dependendo da intensidade das forças Brownianas que tentam *empurrar* as partículas em todas as direções do espaço de forma isotrópica. O parâmetro físico que quantifica a relação entre forças Brownianas e forças de inércia associadas à tendência que determinada partícula possui de continuar seu movimento induzido pela aplicação de uma força externa qualquer (por exemplo a gravidade) é o número de Péclet. Este parâmetro que será definido ainda, é proporcional ao quadrado do raio da partícula e inversamente proporcional à temperatura, de modo que quando o efeito Browniano é fortemente pronunciado, o número de Péclet do sistema tende à zero. Já que sabe-se que partículas menores estarão sujeitas ao efeito líquido de milhares de encontros randômicos entre as moléculas do fluido base e estas e além disso o aumento de temperatura aumenta a agitação molecular, aumentando a tendência destes encontros. Desta forma partículas menores, mesmo que com densidades maiores que a do fluido base, podem não conseguir sedimentar devido ao efeito Browniano.

Em resumo, a estabilidade da suspensão contra agregação induzida por interações magnéticas e contra sedimentação diferencial induzida pela gravidade é garantida através do tamanho diminuto das partículas que compõem o fluido magnético.

1.1.2 Aplicações na indústria, biomedicina e nanotecnologia

Estudos da hidrodinâmica de escoamentos de suspensões magnéticas ainda são incipientes quando comparados aos avanços alcançados nas últimas décadas em outros campos da Mecânica dos Fluidos tais como a aerodinâmica e a modelagem da turbulência. No Brasil, a caracterização de fluidos magnéticos está limitada a poucas universidades e restrita a alguns institutos de Física e Química. No campo da Engenharia, em se tratando da hidrodinâmica de fluidos magnéticos, as contribuições deste país nessa área são mais recentes ainda. Podemos citar por exemplo o trabalho de Miranda (2001), que examinou o comportamento de fluidos magnéticos em células de Hele-Shaw.

No âmbito do Grupo Vortex - Mecânica dos Fluidos de Escoamentos Complexos da Universidade de Brasília, do qual o autor do presente trabalho faz parte, o estudo da dinâmica de fluidos magnéticos em escoamento vem sendo abordado desde 2002. Nesse contexto vale citar os recentes trabalhos de Cunha, Sousa e Morais (2002), que investiga o comportamento dinâmico de bolhas em colapso na presença de campos magnéticos, Sobral e Cunha (2003) que trata da análise de estabilidade de leitos fluidizados magnéticos, Cunha e Sobral (2004), a respeito da caracterização de parâmetros físicos em processos de separação magnética e na determinação de soluções assintóticas para escoamentos em tubos, Cunha et al. (2007) que apresenta uma análise de escala para o problema da convecção magnética em uma cavidade delgada, Couto e Cunha (2008) que estudaram o problema de duas partículas interagindo magneticamente e hidrodinamicamente devido à sedimentação diferencial. Mais recentemente Gontijo e Cunha (2012) através de um trabalho experimental relacionado à convecção magnética comprovaram as análises de escala do trabalho de Cunha et al. (2007) e mais associados ao trabalho apresentado na presente tese Gontijo e Cunha (2012a) e (2012b) apresentaram uma extensão do problema estudado por Couto e Cunha (2008) para duas partículas interagindo magneticamente, porém considerando um pequeno efeito de inércia das partículas e resolvendo o comportamento dinâmico rotacional destas.

Devido à larga faixa de novas possibilidades e aplicações as suspensões magnéticas têm sido usadas em diversos campos da ciência e já vêm sendo empregadas com sucesso em processos industriais. Pode-se destacar o uso de fluidos magnéticos no desenvolvimento de acelerômetros, amortecedores magnéticos, processos de impressão e em bombas magnéticas, nos quais não existe intervenção mecânica para a movimentação do fluido. É comum o uso de partículas magnéticas para a estabilização de suspensões

usadas em reatores e leitos fluidizados conforme explorado recentemente por Cunha, Sobral e Gontijo (2013). Uma outra aplicação é a separação de óleo e água através de meios magnéticos, em que processos de extração de petróleo e de controle de desastres ecológicos podem ser beneficiados (Cunha e Sobral, 2004).

Os trabalhos de Raj e Boulton (1987) e de Raj e Moskowitz (1990) apresentam diversas aplicações industriais e comerciais de suspensões magnéticas, ressaltando a importância e razões de se estudar esse tópico e a importância desses materiais para as tecnologias atuais. Em particular, a magneto-hidrodinâmica e reologia de suspensões magnéticas tem sido usada na medicina para a aplicação e transporte de fármacos e quimioterápicos. Na verdade, trata-se de fluidos magnéticos transportadores de medicamentos capazes de serem guiados pelo corpo do paciente e agirem somente em locais pré-estabelecidos. Esta classe de fluido é conhecida como Fluido Magnético Biocompatível (FMB). Os trabalhos de Lübbe et al. (2001) e Voltairas et al. (2002) apresentam técnicas não intrusivas de manipulação de drogas magnéticas. O Grupo de Interações Biológicas e Biomateriais (Gibb), liderado pela professora Zulmira Lacava, juntamente com o grupo coordenado pelo professor Paulo César de Moraes do Instituto de Física são responsáveis pela pesquisa de FMB na Universidade de Brasília.

Muitas aplicações envolvendo fluidos magnéticos estão restritas mais à possibilidade de manipulação de forças e torques no interior de um fluido magnético devido à aplicação de um campo externo, entretanto o campo de temperatura de uma suspensão também pode ser influenciado por um campo externo de maneira controlável. Uma área particularmente interessante envolvendo o estudo de escoamentos não-isotérmicos de fluidos magnéticos é o fenômeno da convecção termomagnética. Nesta área pode-se citar o trabalho de Neuringer (1966) que investigou a influência conjunta de gradientes térmicos e magnéticos sobre escoamentos de fluido magnético. Os trabalhos de simulação numérica baseados no método de Elementos Finitos de Snyder, Cader e Finlayson (2002) e Tangthieng, Finlayson, Maulbetsch e Cader (1999) utilizam modelos de magnetização acoplados com gradientes de temperatura para explorar o efeito magnético sobre mecanismos de convecção. O trabalho de Mukhopadhyay, Ganguly, Sen e Puri (2005) recentemente investigou a convecção termo-magnética em uma cavidade fechada na ausência de campo gravitacional, cujo campo magnético é gerado por um dipolo em linha. Os estudos de Mukhopadhyay et al. (2005) compararam solução numérica com resultados de análise de escala. Blums, Mezulis, Maiorov e Kronkalns (1997) investigaram a termo-difusão de nanopartículas magnéticas em suspensões coloidais por meio de experimentos.

Apenas como exemplo de aplicação e discussão da física envolvida no escoamento de um fluido magnético não isotérmico podemos tentar compreender o fenômeno da convecção magnética através de uma analogia com o bem conhecido fenômeno da convecção natural/livre. O fenômeno de convecção natural em fluidos é um processo conhecido e largamente estudado na engenharia. A presença de gradientes de temperatura no escoamento provocam estratificação de massa específica no fluido. Se o escoamento estiver sob a ação de um campo gravitacional, forças de empuxo atuam sobre o fluido gerando correntes de convecção. As forças de empuxo descritas acima também são chamadas de força de Boussinesq e o fenômeno da convecção natural também é chamado de convecção termo-gravitacional. Entretanto, se o campo gravitacional estiver ausente no escoamento, ou tratar-se de um ambiente de microgravidade, a estratificação de massa específica não é capaz de gerar uma força de campo de modo a fornecer o movimento ao fluido. Por outro lado, se o fluido em questão for uma suspensão magnética em que um gradiente de campo magnético estiver sendo aplicado e uma estratificação de suscetibilidade magnética estiver presente na suspensão, forças de origem magnética passam a induzir correntes convectivas e, conseqüentemente, movimento no fluido sem qualquer empuxo gravitacional presente. Essas forças magnéticas, também conhecidas por forças de Kelvin, dependem da magnetização M local do fluido função da temperatura e do gradiente do campo magnético ∇H , em que ∇ é o operador gradiente e H o vetor campo magnético. Pode-se observar diferentes modos de movimento no meio fluido, caracterizando o acoplamento entre a hidrodinâmica e o magnetismo.

Devido a estas características a convecção magnética vem sendo empregada em ambientes de microgravidade, em que forças de origem gravitacional não são capazes de fornecer movimento ao fluido. Deste modo, o campo magnético atua como agente externo gerador de correntes de convecção em um fluido termicamente estratificado. Portanto, a convecção magnética é empregada na indústria aeroespacial, no caso de naves e estações espaciais. Além disso, equipamentos elétricos que necessitam de refrigeração podem ser beneficiados aproveitando o próprio campo magnético gerado pelas correntes elétricas no interior dos mesmos. Esses campos atuam sobre o fluido refrigerador (uma suspensão líquida magnética) aumentando a eficiência de troca de calor. Assim, motores elétricos, transformadores de potência e outros equipamentos podem ser melhorados.

Este tema tem atraído o interesse também do Grupo Vortex - Mecânica dos Fluidos de Escoamentos Complexos da Universidade de Brasília. Em 2007 Cunha et al. (2007) desenvolveram uma análise dimensional do problema de convecção magnética

que também tem sido assunto de interesse de pesquisa dentro do Grupo Vortex - Mecânica dos Fluidos de Escoamentos Complexos da Universidade de Brasília. Recentemente, Gontijo e Cunha (2012) mostraram experimentalmente um aumento da ordem de 20 % das taxas de troca de calor no interior de uma cavidade delgada através da aplicação de campos magnéticos moderados da ordem de 300 Gauss utilizando um ímã permanente sobre uma **SMR** com fração volumétrica de 0.5% de esferas microscópicas de maguemita imersas em óleo mineral, sujeitas à um gradiente de temperatura entre as paredes laterais da cavidade. Este aumento nas taxas de troca de calor ocorre devido a um processo mais intenso de mistura no interior da cavidade, que leva a uma distribuição mais homogênea de temperatura, conforme mostrado por Gontijo e Cunha (2012). Neste trabalho os autores também confirmaram experimentalmente os resultados teóricos de Cunha et al. (2007) obtidos por análise de escala que mostram uma lei de potência para a quantificação do aumento das taxas de troca de calor no interior de uma cavidade delgada em função da intensidade das forças de empuxo magnéticas geradas por gradientes de campo externo aplicado no domínio do escoamento.

Muitas aplicações tecnológicas importantes de suspensões magnéticas foram baseadas simplesmente na possibilidade de fixar o fluido em uma determinada posição com a presença de um campo magnético. É o que ocorre, por exemplo, quando uma gota de fluido magnético é colocada no espaçamento entre um ímã e um eixo rotativo. No pequeno espaçamento entre o eixo e o ímã, um campo magnético com intensidade controlada é usado para fixar o ferrofluido e pressões de vedação em torno de 1Bar podem ser obtidas sem grandes dificuldades. Novas idéias têm surgindo a medida que se desenvolve um maior controle das propriedades e dos escoamentos dos fluidos magnéticos. Essas possibilidades de aplicações de fluidos magnéticos em movimento começam a ser consideradas no campo da viscoelasticidade com foco em sistemas de amortecimento ou em convecção magnética em que se tem um escoamento térmico que pode ser magneticamente controlado. Ambas aplicações foram discutidas no presente trabalho. Aplicações dos fluidos magnéticos no campo da biomedicina também foram tratadas nessa exposição. Em particular, a magnetohipertermia para tratamento do câncer pela geração de calor em um tecido tumoral, induzida pela re-orientação alternada ou vibração das partículas na presença de um campo magnético alternado (AC). Numa perspectiva para novas aplicações de fluidos magnéticos podemos pensar no fenômeno da cavitação caracterizado pelo colapso de bolsas de vapor em rotores de máquinas hidráulicas que pode produzir um alto nível de ruído e desgaste irreversíveis das partes móveis internas do equipamento. Com a inserção de partículas magnéticas em baixas concentrações seria possível inibir o colapso dessas bolhas e assim atenuar a

cavitação de máquinas hidráulicas (Cunha, Sousa e Morais, 2002).

A utilização de partículas magnéticas para estabilização de leitos fluidizados contra a formação de vazios ou ondas de concentração é também vista como uma aplicação promissora dos escoamentos de fluidos magnéticos (Sobral e Cunha, 2005). Com isto seria possível operar em regimes de fluidização mais homogêneos, tornando as trocas de energia e massa em reatores fluidizados mais eficientes. A redução da resistência de escoamentos usando fluidos magnéticos tem se tornado mais recentemente um grande atrativo (Cunha e Sobral, 2005). A força magnética atuando sobre as partículas de um líquido magnetizado na presença de gradientes de campo magnético favoráveis a direção da queda de pressão podem aumentar em patamares consideráveis a vazão do escoamento o que de certa forma poderia ser interpretado como uma diminuição da resistência do escoamento. Conseqüentemente, uma economia da energia necessária para o transporte de líquidos em grandes extensões de tubulações como ocorre em oleodutos, poderia ser significativo. Vale investir também no uso de nanopartículas magnéticas encapsuladas (compósitos magnéticos) ou magnetolipossomos na microcirculação. Novamente, com a aplicação de gradientes de campo favoráveis ao sentido do movimento seria possível diminuir o fator de atrito do escoamento.

Enfim, as áreas de aplicação de suspensões magnéticas para a solução de problemas práticos são inúmeras e nessa seção procurou-se citar apenas alguns exemplos a fim de ilustrar a riqueza que esta nova classe de fluidos proporciona tanto em termos de estudo da física associada à descrição do movimento destas suspensões quanto do ponto de vista de utilização destes fluidos no desenvolvimento de novas tecnologias na área de engenharia, biologia e medicina. A próxima seção procura trazer uma revisão bibliográfica específica associada aos tópicos abordados na presente tese.

1.2 Revisão bibliográfica Específica

O presente trabalho aborda tanto aspectos macroscópicos a cerca da modelagem das equações de balanço que regem o movimento de fluidos magnéticos na presença de um campo externo aplicado, quanto aspectos microestruturais relacionados à dinâmica de partículas sólidas imersas em um fluido Newtoniano interagindo hidrodinamicamente e magneticamente. Estas duas abordagens são complementares, uma vez que importantes propriedades de transporte de suspensões magnéticas como a viscosidade da suspensão e a magnetização desta, oriundas do comportamento microestrutural, estão

diretamente acopladas com as equações de balanço que regem os campos de velocidade e pressão de escoamentos de suspensões magnéticas na presença de um gradiente de campo.

Muitos autores vem estudando esta mecânica dos fluidos de suspensões magnéticas através de uma abordagem conhecida como Ferrohidrodinâmica, na qual o tensor de tensões do fluido contínuo equivalente (suspensão líquido + partículas magnéticas de tamanho nanométrico) é modificado pela presença de tensões extras devido à efeitos magnéticos. Como estas tensões magnéticas dependem dos valores locais dos campos de magnetização \mathbf{M} e campo externo aplicado \mathbf{H} o acoplamento entre a hidrodinâmica e as equações de Maxwell é inevitável e a solução dos principais campos relacionados às grandezas físicas necessárias à completa descrição do escoamento exige um acoplamento fisicamente consistente dessas duas áreas da física clássica.

1.2.1 Fechamento das equações da FHD para fluidos assimétricos

Com relação ao sistema acoplado de equações diferenciais parciais que regem os principais campos vetoriais da hidrodinâmica e do magnetismo, atualmente ainda não existe um consenso neste campo. Muitos trabalhos consideram para a modelagem das forças magnéticas que atuam num volume infinitesimal de fluido modelos simples de magnetização de equilíbrio e a formulação do potencial magnético para a quantificação do campo externo aplicado a partir de uma equação de Poisson. Esta abordagem não é válida para fluidos magnéticos com qualquer grau de assimetria do tensor de tensões.

A presente tese pretende mostrar a importância da solução da equação do momento angular baseada na versão rotacional da segunda lei de Newton aplicada a um elemento infinitesimal de fluido magnético na presença de torque magnéticos internos. Alguns autores tem levantado a importância do estudo da equação do momento angular para a descrição do comportamento de fluidos magnéticos assimétricos em escoamento. Um dos primeiros trabalhos nessa linha foi escrito em 1963 e publicado na revista Nature por Dahler e Scriven (1963), neste trabalho os autores apenas mostram a importância de se resolver a equação do momento angular para um meio contínuo na presença de torques internos.

Como em muitos casos o fluido estudado é um fluido não polar (fluido Newtoniano na ausência de torques internos) a única conclusão que o princípio do balanço de

momento angular nos fornece é de que este fluido possui um tensor de tensões simétrico. Entretanto para um fluido magnético, que na presença de um campo externo pode estar sujeito à existência de torques internos (desde que a magnetização do fluido não esteja alinhada com o campo aplicado) a aplicação deste mesmo princípio leva ao surgimento de uma nova equação evolutiva, inclusive com novas constantes materiais associadas ao efeito magnetoviscoso. Dois trabalhos importantes reforçam a necessidade de se investigar a equação do momento angular para a descrição do comportamento de fluidos magnéticos assimétricos em escoamento, são estes os trabalhos de Rosensweig (1994) e Rinaldi e Brenner (2002a).

Outros autores já investigaram o comportamento de fluidos magnéticos escoando na presença de torques, dentre estes podemos citar os trabalhos de Zahn (1990), Zahn et al. (1993), Zahn et al. (1999), Rinaldi et al. (2002) e Chang (2003). Dentre os quais os trabalhos de Zahn et al. (1999) e Rinaldi et al. (2002b) investigaram o efeito da viscosidade rotacional associada ao esforço extra que um carregamento cisalhante deve fazer para desorientar as partículas magnéticas da direção preferencial de um campo aplicado e rotacioná-las no sentido da vorticidade do fluido.

Conforme veremos mais para frente o efeito magnetoviscoso é de extrema importância no acoplamento da dinâmica rotacional com o comportamento translacional de fluidos magnéticos assimétricos em escoamentos. Muitos autores vem investigado tanto do ponto de vista teórico quanto experimental o comportamento da magnetoviscosidade de suspensões magnéticas coloidais, dentre os quais podemos citar os trabalhos pioneiros de Hart et al. (2001), Rinaldi et al. (2002b), Patel et al. (2003) e Rinaldi et al. (2005).

A questão principal consiste em responder à seguinte pergunta: *como acoplar o movimento rotacional das partículas fluidas às forças translacionais que atuam no escoamento e alteram o campo de velocidades deste?* A resposta para esta pergunta, como a presente tese pretende responder através de capítulos específicos para essa discussão está na equação evolutiva da magnetização do fluido em escoamento.

Uma das primeiras formulações para uma equação evolutiva da magnetização considerando a influência de torques magnéticos internos nos valores do campo de magnetização do fluido, foi proposta por Shilomi et al. (1994). Neste modelo os autores propõem que a magnetização de um fluido em escoamento varia em relação à magnetização de equilíbrio deste devido à transientes operacionais, efeitos convectivos e à

vorticidade do fluido em escoamento. Cunha e Sobral (2004) propõem uma modelagem ligeiramente diferente da de Shilomis et al. (1994) considerando uma escala de tempo de relaxação magnética para mensurar o desvio da magnetização do fluido em escoamento da magnetização de equilíbrio da suspensão em conjunto com efeitos convectivos e da vorticidade do escoamento.

O presente trabalho pretende trazer uma discussão sobre a forma com a qual se deve acoplar o efeito de rotação do fluido base e das partículas magnéticas com a magnetização da suspensão e conseqüentemente com o movimento do fluido magnético como um todo. Esta seria a maior contribuição do ponto de vista de uma discussão **macroscópica** do sistema de equações **contínuas** que regem o movimento de fluidos assimétricos na presença de campo.

Como a maior parte do presente trabalho tem como **foco** o estudo da **dinâmica microestrutural** de suspensões magnéticas através de análises numéricas e teóricas realizadas na escala das partículas, a seção referente à revisão bibliográfica específica deste trabalho no âmbito do estudo microestrutural será dividida em duas, conforme mostrado a seguir.

1.2.2 Problema de duas partículas

Já do ponto de vista de estudos microestruturais do comportamento dinâmico de sistemas particulados envolvendo interações magnéticas, este estudo é também incipiente no contexto global. Muitos autores estudaram exaustivamente o problema de sistemas particulados envolvendo interações hidrodinâmicas, porém a adição de interações magnéticas traz novos desafios, já que este novo mecanismo de interação demanda a solução do movimento rotacional das partículas e do conseqüente acoplamento desta dinâmica na evolução temporal dos momentos de dipolo de cada partícula que compõe uma suspensão magnética.

Muitos estudos tem sido feitos nos últimos 40 anos envolvendo a análise do comportamento de sistemas diluídos nos quais interações entre pares de partícula dominam a física da suspensão. Nesse contexto é comum o uso de uma abordagem que considera apenas duas partículas interagindo hidrodinamicamente. A interação entre as partículas é forçada através de sedimentação diferencial ou para partículas livres da

ação líquida da gravidade através de um cisalhamento simples (mais no contexto de reologia).

Pelo princípio da reversibilidade cinemática em baixos números de Reynolds, que surge como uma consequência da linearidade das equações de Stokes, sabe-se que as trajetórias relativas entre duas partículas interagindo tanto por sedimentação diferencial quanto por cisalhamento simples em sistemas *neutrally buoyant* na ausência de inércia de partícula, rugosidade de partícula, deformações superficiais ou outros tipos de interação devem ser reversíveis.

A análise da quebra desta reversibilidade por outros mecanismos pode ser utilizada para a compreensão e quantificação do efeito de dispersão hidrodinâmica em suspensões através de interações magnéticas, forças atrativas de van der Waals, forças de repulsão eletrostática, rugosidade superficial, deformação de gotas, entre outros. As figuras (1.8a) e (1.8b) ilustram a sensibilidade da quebra de trajetória relativa devido à efeitos como rugosidade superficial associadas à imperfeições geométricas.

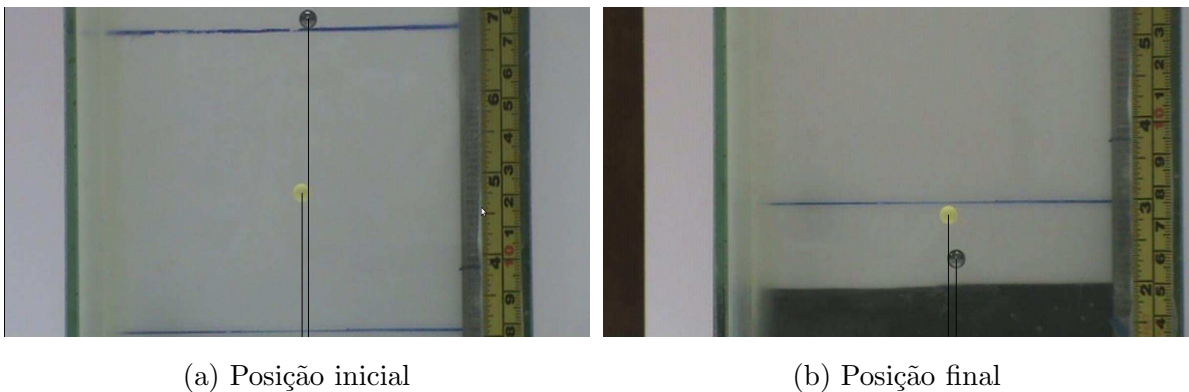


Figura 1.8: Fotografia obtida através de um vídeo feito no laboratório de Reologia e Microhidrodinâmica do Grupo Vortex - UnB. As figuras mostram a posição inicial (a) e final (b) de um par de esferas de plástico interagindo hidrodinamicamente. O encontro é forçado devido ao mecanismo de sedimentação diferencial, já que as esferas possuem diâmetros diferentes e massas específicas também diferentes. É possível notar uma ligeira quebra na reversibilidade da trajetória entre as esferas. A esfera com revestimento metálico que inicialmente se encontra em cima não retorna à mesma posição após o encontro. Essa quebra se deve devido à imperfeições geométricas na construção das esferas e a pequenos efeitos de rugosidade superficial. Neste caso específico o desvio em relação à posição inicial no plano perpendicular à gravidade equivale a 5% do diâmetro médio das esferas. O número de Reynolds típico do escoamento induzido nesse experimento é $Re \sim 10^4$

Do ponto de vista do estudo da dinâmica de suspensões de esferas rígidas interagindo hidrodinamicamente vários estudos podem ser citados. Nir e Acrivos (1973) resolveram de maneira exata, através de coordenadas esféricas o problema de duas esferas de diâmetros arbitrários no limite em que ambas se encontram muito próximas (*touching limit*). Uma das aplicações deste tipo de solução segundo os autores seria na tentativa de determinação da correção $\mathcal{O}(\phi^2)$ para a viscosidade efetiva de uma suspensão de esferas rígidas através do estudo de trajetórias relativas de partículas bidispersas sujeitas a cisalhamento simples.

Alguns anos depois Jeffrey e Onishi (1984) determinaram através do método das reflexões o cenário completo das funções escalares necessárias para a determinação de forças e torques (problema de resistência) ou velocidades angulares e lineares (problema de mobilidade) para duas esferas de diâmetros diferentes sedimentando sob a ação da gravidade. A partir do trabalho pioneiro dos autores é possível determinar as trajetórias relativas produzidas pelo encontro das partículas em diferentes contextos de microhidrodinâmica, avaliando inclusive o efeito de quebra de reversibilidade cinemática devido a outros mecanismos externos como rugosidade superficial (Cunha e Hinch, 1996), interações magnéticas (Cunha e Couto, 2008), entre outros. Em certo sentido o trabalho de Jeffrey e Onishi (1984) abriu as portas para inúmeros estudos associados à dispersão hidrodinâmica de suspensões diluídas.

Em um estudo posterior Jeffrey (1992) explorou em maiores detalhes todas as funções necessárias para a determinação de forças, torques e stresslet em um problema de duas esferas com massas específicas e diâmetros diferentes, interagindo hidrodinamicamente, sujeitas ao efeito de sedimentação diferencial. O trabalho é uma extensão de seu trabalho pioneiro de 1984 e traz como novidade a inclusão do stresslet atuante nas partículas. A forma na qual estas funções são apresentadas é válida para os dois regimes limites de grandes separações e no contato próximo.

Neste mesmo ano Dabros et al. (1992) estudaram as trajetórias relativas entre uma partícula fixa em um plano vertical e uma segunda partícula livre para se movimentar, sedimentando sob a ação da gravidade. Os autores consideraram forças de repulsão hidrodinâmica no limite em que as esferas encontram-se próximas segundo a teoria da lubrificação e para computar interações hidrodinâmicas de longo alcance utilizaram o tensor de Oseen com as funções resistência detalhadas por Jeffrey (1984). A ideia principal deste trabalho consistia em fornecer interpretações físicas para a quebra de reversibilidade nas trajetórias relativas devido a efeitos de rugosidade superficial e

forças coloidais interpartícula.

Ainda em 1992 Acrivos, Batchelor e Hinch (1992) apresentaram um cálculo do coeficiente de auto-dispersão hidrodinâmica induzido por cisalhamento na direção longitudinal do escoamento. Os autores utilizam como base o problema de duas partículas livres da ação líquida da gravidade sujeitas a um cisalhamento simples, desconsiderando efeitos de inércia de partícula e movimento Browniano. Através da integração do deslocamento líquido na direção do escoamento de todas as possíveis trajetórias relativas os autores determinam uma expressão logarítmica para o coeficiente de auto-dispersão longitudinal induzido por cisalhamento no regime diluído. Apesar do coeficiente de auto-dispersão ser mais intenso na direção transversal do escoamento induzido por cisalhamento, este trabalho é importante no sentido de determinar uma primeira abordagem analítica na tentativa de determinação de coeficientes de auto-dispersão hidrodinâmica induzidos por cisalhamento e mostra que existe um processo de dispersão induzido na direção longitudinal do escoamento.

Cunha e Hinch (1996) avaliaram o efeito de quebra de reversibilidade cinemática em baixo número de Reynolds devido à presença de rugosidade superficial para o problema de duas esferas interagindo hidrodinamicamente na ação de um cisalhamento simples. Como se sabe (Batchelor e Green, 1972), duas esferas lisas, livres de forças interpartícula (eletrostática, van der Waals, interação magnética, entre outras), sem inércia e na ausência de movimento Browniano estão sujeitas ao princípio da reversibilidade cinemática em baixos números de Reynolds devido à linearidade das equações de Stokes. Cunha et al. mostram neste trabalho pioneiro como um pequeno efeito de rugosidade superficial pode quebrar essa reversibilidade e em uma escala maior (contexto de suspensões) acaba por levar a suspensão a um estado de maior *mixing*. Este processo de *mixing* ocorre em uma escala microestrutural muito maior que a escala molecular pode ser interpretada como um processo de dispersão hidrodinâmica. Neste trabalho através da análise de diversas trajetórias relativas os autores quantificam estes coeficientes de dispersão no regime de suspensões diluídas no qual as interações dominantes ocorrem entre pares de partículas.

Wang e Acrivos (1996) estudaram a dinâmica de suspensões de esferas rígidas diluídas através de técnicas analíticas para esferas separadas e numéricas para a dinâmica “near contact” para determinar o comportamento dos coeficientes de difusão (difusividades) transversais do líquido e das partículas quando sujeitos a condição de cisalhamento simples. Neste trabalho os autores encontraram valores para a anisotropia destes

coeficientes de difusão (direção transversal e longitudinal do shear) da ordem de 22.

Apesar de um grande número de trabalhos teóricos envolvendo o estudo em detalhes do comportamento de interação entre duas esferas para a melhor compreensão da física de suspensões diluídas, alguns autores desenvolveram grandes trabalhos experimentais comprovando as teorias desenvolvidas nos últimos anos focadas no problema de interação entre dois corpos, como é o caso de Zeng et al. (1996) e Ekiel-Jezewska et al. (1999).

Em 1996 Zeng et al. (1996) estudaram em detalhes o efeito da rugosidade superficial das esferas na quebra de reversibilidade das trajetórias, desenvolvendo uma complementação experimental do trabalho pioneiro de Cunha e Hinch (1996). Já Ekiel-Jezewska et al. (1999) realizaram um estudo experimental colocando uma esfera fixa no interior de um fluido viscoso suspensa por uma haste e soltando uma segunda esfera em uma posição inicial acima da esfera fixa para forçar a interação entre outras. Neste trabalho tomou-se grande cuidado para evitar que as paredes do recipiente e o suporte da esfera fixa interferissem no comportamento do sistema particulado. O objetivo principal consistia em determinar experimentalmente a influência de efeitos difíceis de serem considerados em modelos teóricos, como rugosidade superficial e inércia de partícula a fim de se criar um modelo simples que contabilizasse interações hidrodinâmicas e forças de contato que se ajustasse ao comportamento observado em laboratório.

Isidro et al. (2001) exploraram o efeito de polidispersidade de um par de esferas rígidas e apresentam resultados interessantes para o coeficiente de auto-difusão (self diffusivity) e para o coeficiente de difusão induzido por gradientes de concentração (gradient diffusivity) em função do parâmetro de polidispersidade que mede a razão entre os raios das esferas. Eles determinaram também o efeito da polidispersidade na distância mínima entre as esferas no momento da passagem de uma pela outra e encontraram que esta distância possui um valor mínimo para esferas de mesmo diâmetro, que cresce monotonicamente quando a razão entre os raios das esferas vai para zero ou infinito. Eles também exploraram brevemente o efeito de quebra de reversibilidade nas trajetórias relativas devido à efeitos de rugosidade superficial, confirmando os resultados obtidos anteriormente por Cunha et al. (1996).

Outros autores, como Ekiel-Jezewska et al. (2002) exploraram também o efeito de rotação induzida por interações hidrodinâmicas. Este efeito é particularmente importante, como será visto no presente trabalho, na determinação do comportamento de

suspensões magnéticas, pois pelo fato das partículas estarem sujeitas à presença de torques por interações magnéticas estas podem ter seus momentos de dipolo desorientados de determinadas direções o que influencia diretamente nas taxas de agregação (associada à estabilidade da suspensão) e dispersão das partículas que compõe a suspensão. Nesse sentido a presente Tese é um trabalho pioneiro por considerar a influência de torques induzidos por interações magnéticas no comportamento de suspensões magnéticas.

Mais recentemente, Cunha e Couto (2008) exploraram os efeitos de quebra de reversibilidade no problema de duas partículas interagindo hidrodinamicamente devido ao efeito de sedimentação diferencial na presença de interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas. Neste estudo pioneiro os autores não consideraram o efeito de rotação das partículas, apenas o efeito da variação da velocidade translacional destas induzido por interações magnéticas, mantendo os dipolos de cada partícula fixos durante o processo de evolução temporal. Através deste estudo os autores determinaram uma primeira estimativa das taxas de agregação e dispersão hidrodinâmicas induzidas por interações magnéticas em sistemas particulados diluídos nos quais interações entre pares dominam a dinâmica da suspensão.

1.2.3 Problema de muitos corpos

Como pode ser visto na breve revisão feita nesta introdução, o estudo da dinâmica de sistemas particulados diluídos através de um modelo de duas partículas interagindo tem atraído a atenção de muitos pesquisadores ao longo dos últimos 40 anos. A possibilidade de consideração de diversos mecanismos físicos associados à interação entre as partículas permite em determinadas situações desenvolvimentos teóricos acerca do comportamento global médio de suspensões diluídas utilizando apenas a mecânica de duas partículas. Além disso do ponto de vista computacional a consideração de apenas duas partículas permite que diversas simulações sejam feitas com um baixo custo computacional, o que possibilita a avaliação da influência de diferentes parâmetros físicos, bem como diferentes condições iniciais da posição das esferas em um tempo relativamente curto. Porém, o modelo de duas partículas não pode ser utilizado para avaliar o comportamento global de suspensões mais concentradas.

Em um estudo recente Kuznetsova e Ivanov (2001) determinaram analiticamente a influência de um terceiro corpo interagindo magneticamente com as outras duas partículas no valor da magnetização de equilíbrio de uma suspensão magnética um

pouco mais concentrada. Neste trabalho pioneiro, que será muito utilizado como base de comparação na presente Tese, os autores conseguiram propor um modelo de magnetização de equilíbrio ordem $O(\phi^3)$, que computa a magnetização da suspensão em função de α e ϕ , em que α representa a energia do campo magnético adimensionalizada pela energia das flutuações Brownianas, enquanto ϕ denota a fração volumétrica de partículas. Os resultados teóricos de Kuznetsova e Ivanov (2001) fornecem um bom comportamento para suspensões magnéticas com frações volumétricas de até 20% quando comparados com outros trabalhos experimentais. Entretanto os autores não consideram efeitos hidrodinâmicos no comportamento da magnetização da suspensão, ou seja, são válidos para o limite no qual $Pe \rightarrow 0$, ou seja, suspensões coloidais. Para suspensões magnéticas não coloidais, nas quais o efeito hidrodinâmico passa a ser importante na dinâmica do sistema, não existe até o momento um modelo de magnetização teórico ou baseado em simulação computacional para prever o comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão em função de α , Pe e ϕ , em que ϕ é a fração volumétrica de partículas, definida como

$$\phi = \frac{Nv_p}{v_t} = nv_p, \quad (1.4)$$

em que N é o número de partículas da suspensão, $v_p = (4/3)\pi a^3$ é o volume da partícula, sendo a o raio desta, v_t é o volume total da suspensão (líquido + partículas) e $n = N/v_t$ é chamado de número de densidade. Este problema em aberto pretende ser abordado na presente Tese.

Quando a formulação de dois corpos não pode mais ser utilizada para a compreensão da dinâmica de sistemas particulados mais concentrados, deve-se buscar uma metodologia capaz de computar efeitos de interações de longo e curto alcance entre muitos corpos. Para computar os efeitos de interação hidrodinâmica entre partículas imersas em um fluido base Newtoniano cujo movimento ocorre em baixos números de Reynolds, técnicas matemáticas de microhidrodinâmica baseadas na solução das equações de Stokes ($\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ e $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) devem ser aplicadas para computar as forças induzidas ou o campo de velocidades produzido em um ponto qualquer do fluido devido à presença de uma partícula se movimentando no meio. A metodologia matemática para a determinação e quantificação dessas forças ou velocidades passa pela solução fundamental das equações de Stokes, pelo uso do teorema recíproco, pela dedução das leis de Faxén, pela determinação do tensor mobilidade de Rotne-Prager e pela posterior aplicação deste tensor em sistemas periódicos utilizando a técnica das somas de Ewald (1921) realizada pela primeira vez para o caso hidrodinâmico por Beenaker (1986). Todas estas técnicas serão discutidas em detalhes em seções futuras.

A computação das interações hidrodinâmicas em problemas de sedimentação é de fundamental importância para uma descrição consistente de propriedades médias da suspensão, já que mesmo em baixos números de Reynolds o movimento de cada partícula é totalmente dependente da configuração das outras partículas e vice-versa, de modo que em termos médios é possível observar flutuações significativas e trajetórias totalmente não lineares das partículas devido a estas interações. Estudos envolvendo este tipo de interação surgiram a medida que alguns fenômenos físicos contraintuitivos foram sendo observados em problemas de sedimentação em fluidos muito viscosos, como por exemplo o movimento de partículas com massa específica maior que a do fluido base no sentido oposto ao da aceleração gravitacional devido à influência de outras partículas. Este fenômeno é ilustrado esquematicamente na figura (1.9).

Alguns trabalhos importantes podem ser citados com relação à determinação da influência destas interações na velocidade média de sedimentação da suspensão. Richardson-Zaki (1954) determinaram uma correlação empírica que corrige a velocidade média da sedimentação em função da fração volumétrica de partículas ϕ do sistema. Esta correlação é largamente empregada até hoje e é dada por

$$\langle u(\phi) \rangle = U_s (1 - \phi)^n, \quad (1.5)$$

com n geralmente da ordem de 5, já fitando de forma satisfatória medições experimentais para baixos números de Reynolds e com frações volumétricas de partícula de até 20%. Batchelor (1972) desenvolveu uma análise teórica para suspensões infinitamente diluídas e obteve uma expressão para o comportamento da velocidade média de sedimentação de suspensões monodispersas para pequenos valores de ϕ . Diversas bases de dados teóricas, numéricas e experimentais podem ser utilizadas para a predição da velocidade média de sedimentação de sistemas particulados devido à presença de interações hidrodinâmicas. Dentre estas algumas consideram efeitos de polidispersidade do sistema, como Batchelor (1982), Batchelor e Wen (1982) e Davis e Acrivos (1985).

Apesar da determinação da velocidade média de uma suspensão sujeita a interações hidrodinâmicas em regimes de baixos números de Reynolds ser um problema bem conhecido sem muitas questões em aberto, não se sabe como a influência de interações magnéticas modifica esta propriedade. Sabe-se que interações magnéticas entre as partículas são capazes de quebrar a randomicidade na distribuição de partículas na suspensão podendo formar agregados irreversíveis que por sua vez sedimentarão mais rápido que partículas isoladas não pertencentes a nenhum tipo de estrutura agregativa e esse fato pode alterar a velocidade média de sedimentação do sistema. Porém não

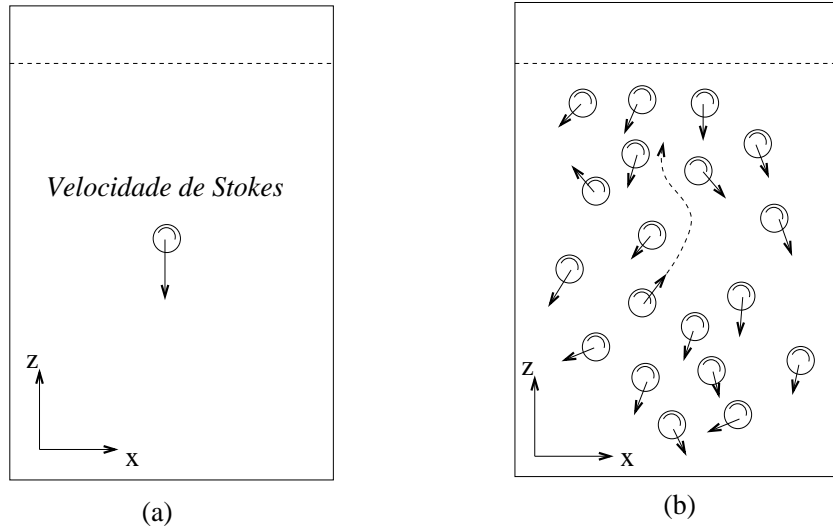


Figura 1.9: Ilustração do efeito das interações hidrodinâmicas na velocidade média de sedimentação de uma suspensão. Na figura (a) têm-se uma partícula isolada sem inércia sedimentando em um fluido viscoso em regimes de baixos números de Reynolds com a velocidade de Stokes. Já na figura (b) é possível notar que a velocidade de cada partícula é alterada em relação à velocidade de Stokes devido à influência das outras partículas que compõem a suspensão. É possível notar por exemplo que pode haver uma ou mais partículas se movimentando em sentido ascendente, contra a direção da gravidade devido à influência das outras.

existe ainda um modelo ou resultado teórico baseado em simulações de muitos corpos para prever como a intensidade destas interações magnéticas e a fração volumétrica das partículas influencia esta velocidade média. O presente trabalho pretende responder essas questões mostrando como interações magnéticas influenciam a variação da velocidade média do sistema em função do parâmetro de interação magnética entre os momentos de dipolo das partículas e da fração volumétrica de partículas.

Outra propriedade média importante na análise do comportamento estatístico de suspensões de partículas em sedimentação consiste na variância da velocidade média. Este problema ainda encontra-se em aberto. A grande questão envolvendo o estudo teórico e computacional de flutuações em suspensões através da análise da variância do sistema consiste na não convergência desta propriedade com o tamanho do sistema. Em outras palavras, análises teóricas e simulações computacionais de sistemas particulados nos quais as partículas encontram-se sujeitas apenas à interações hidrodinâmicas predizem que a variância do sistema tende a infinito conforme o número de partículas tende ao limite termodinâmico, ou seja, quando $N \rightarrow \infty$, em que N é o número de partículas que compõem a suspensão. Este problema de divergência tem sido assunto

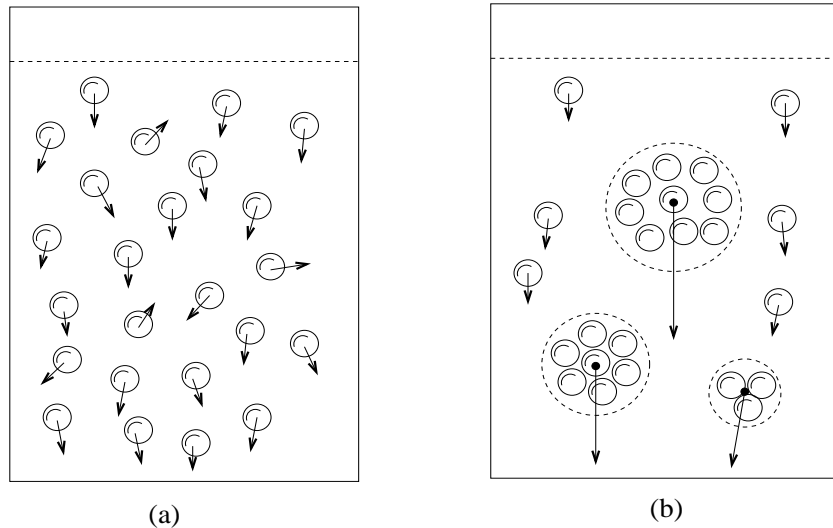


Figura 1.10: Ilustração do efeito das interações hidrodinâmicas e magnéticas na velocidade média de sedimentação de uma suspensão. Na figura (a) considerando apenas interações hidrodinâmicas nota-se uma alteração na velocidade de cada partícula devido à influência das outras partículas, porém sem a quebra de randomicidade na distribuição espacial das partículas que compõem a suspensão. Já na figura (b), considerando interações magnéticas entre as partículas (sem um campo externo aplicado) é possível notar a formação de agregados irreversíveis que sedimentam mais rápido que as partículas isoladas não pertencentes a um agregado.

de diversos trabalhos teóricos, tendo sido identificado pela primeira vez por Caffish e Luke (1985), sendo estudado posteriormente por Hinch (1988), Koch e Shaqfeh (1991), Ladd (1993), Koch (1994), Cunha (1995) e (1997), Abade e Cunha (2002), entre outros.

Especula-se que este comportamento divergente apresentado em modelos teóricos e simulações computacionais e ausente em observações experimentais, conforme mostrado por Nicolai e Guazzelli (1995), esteja associado à natureza de longo alcance das interações hidrodinâmicas e a incapacidade de quebra da randomicidade da configuração da suspensão devido à presença apenas deste tipo de interações. No presente trabalho é feita uma análise extensa com relação à convergência da variância do sistema na presença de interações magnéticas. Nesse sentido o presente trabalho pretende contribuir com esse antigo problema de fechamento mostrando que em algumas condições do parâmetro associado à interação magnética entre as partículas esse problema de convergência não é manifestado.

Ainda nesta linha Abade e Cunha (2002) estudaram flutuações de velocidade em sedimentação de muitos corpos interagindo hidrodinamicamente, sujeitos ao empuxo

líquido da gravidade e a efeitos de polidispersidade. Neste trabalho os autores propuseram uma metodologia computacional robusta e consistente para simular interações hidrodinâmicas em sistemas de muitos corpos na ausência de interações magnéticas. Utilizando a mesma metodologia Abade e Cunha (2007) também estudaram o comportamento de agregados em sedimentação e obtiveram resultados compatíveis com trabalhos experimentais e análises de escala baseadas no balanço de forças viscosas e de empuxo líquido gravitacional aplicadas ao agregado.

Muitos pesquisadores tem investigado nos últimos anos metodologias computacionais utilizadas para simular o comportamento dinâmico de suspensões de partículas. O presente trabalho pretende ser pioneiro no sentido de considerar não só interações hidrodinâmicas periódicas convergentes, como acrescentar forças e torques induzidos por interações magnéticas, bem como outros mecanismos físicos como movimento Browniano, forças de lubrificação e de contato e empuxo líquido gravitacional. Esta metodologia será discutida, apresentada, validada e todos os resultados produzidos através de diversas simulações computacionais considerando diversos aspectos da suspensão serão interpretados fisicamente

1.3 Objetivos

A presente tese de Doutorado visa explorar diversos tópicos relacionados à hidrodinâmica de fluidos magnéticos com foco no comportamento microestrutural de suspensões magnéticas coloidais e não coloidais. Além de uma profunda investigação do comportamento dinâmico de sistemas particulados compostos por partículas magnéticas de diferentes tamanhos (micropartículas e nanopartículas) através de uma abordagem numérico-teórica, pretende-se também discutir aspectos físicos importantes referentes ao sistema de equações governantes que regem os campos das principais grandezas físicas associadas à descrição de escoamentos de fluidos magnéticos.

A discussão acerca das equações de balanço da ferrohidrodinâmica é essencial em um trabalho como este, visto a grande dependência do comportamento macroscópico de um escoamento de um fluido magnético com a dinâmica microestrutural destas suspensões.

Do ponto de vista macro o estudo apresentado na presente Tese é pautado na seguinte sequência lógica:

- Revisão teórica do atual sistema de equações de balanço da ferrohidrodinâmica;
- Estudo aprofundado acerca do efeito da assimetria do tensor de tensões magnéticas e sua relação com a equação evolutiva do momento angular;
- Discussão detalhada e uma nova proposta para uma nova equação evolutiva para a magnetização da suspensão;
- Interpretação física de uma nova constante material associada ao efeito magnetoviscoso;
- Exemplo do procedimento utilizado para a medição do efeito magnetoviscoso através de uma medição realizada no Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia do Grupo Vortex da Universidade de Brasília;
- Discussão sobre o acoplamento da dinâmica microestrutural e sua influência em alguns dos parâmetros associados às equações de balanço macroscópicas da ferrohidrodinâmica para a descrição do movimento de um fluido magnético assimétrico.

Com relação ao estudo do comportamento microestrutural de suspensões magnéticas, que é na verdade o foco principal deste trabalho, a seguinte sequência lógica é apresentada a fim de nortear o leitor com relação à forma que as discussões e resultados serão apresentados nas seções posteriores.

- Estudo detalhado do comportamento de uma única partícula imersa em um fluido viscoso, com inércia e sujeita a movimento Browniano;
- Estudo da dinâmica de duas partículas que interagem hidrodinamicamente e magneticamente para a compreensão detalhada do efeito de rotação das partículas e sua influência na estabilidade de suspensões magnéticas do ponto de vista de agregação e dispersão hidrodinâmica;
- Proposta de um modelo teórico e descrição de um código computacional utilizado para o estudo da dinâmica de sistemas de muitos corpos que interagem magneticamente para a obtenção de propriedades macroscópicas associadas à dinâmica micro, tanto de suspensões magneto-reológicas quanto de ferrofluidos, o foco desta proposta é fornecer um primeiro modelo para um estudo mais avançado e aprofundado do comportamento microestrutural de suspensões magnéticas com pequenos efeitos de inércia de partículas, sem considerar interações hidrodinâmicas;

- Validação deste código através de uma comparação dos resultados numéricos apresentados para o comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão com os modelos teóricos existentes na literatura que não consideram efeitos hidrodinâmicos no comportamento dos sistemas particulados magnéticos;
- Construção de um código computacional mais robusto, capaz de considerar diversos mecanismos físicos atuantes em cada partícula, dentre eles: forças Brownianas, forças por interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas, forças magnéticas devidas à aplicação de um campo externo, efeito do empuxo líquido associado à força gravitacional para suspensões de partículas com densidades diferentes da do fluido base, forças repulsivas de curto alcance devido à lubrificação, forças de contato associadas ao choque de partículas, forças por interações hidrodinâmicas, torques Browianos, torques por interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas, torques magnéticos devidos à aplicação de um campo externo, torque viscoso associado à viscosidade do fluido base;
- Neste cenário pretende-se estudar o efeito das interações magnéticas na estabilidade do código em termos de um estudo detalhado da convergência de propriedades estatísticas importantes na descrição do comportamento de sistemas particulados;
- Proposta de um modelo de magnetização de equilíbrio capaz de considerar os efeitos hidrodinâmicos no comportamento da suspensão;

1.4 Detalhamento dos objetivos

A primeira linha da presente pesquisa procura estudar as equações de balanço que governam escoamentos de fluidos magnéticos, do ponto de vista da ferrohídrodinâmica, já que algumas questões envolvendo a modelagem macroscópica destes escoamentos encontram-se ainda em aberto. Nesse sentido estas equações serão exploradas na seguinte ordem:

- Equação constitutiva para o tensor magnético;
- A equação do movimento para um fluido magnético;
- Assimetria do tensor de tensões para fluidos polares e a equação evolutiva do momento angular;

- Equação evolutiva da magnetização;
- A equação do potencial magnético;
- A equação da energia para fluidos magnéticos;
- Equação da entropia para suspensões magnéticas;

O ponto chave desta discussão consiste na proposição de uma nova formulação para o problema de fechamento das equações de Maxwell do Eletromagnetismo no regime Magnetostático com as equações da ferrodinâmica. O problema surge devido a uma discussão ainda em aberto em relação à equação evolutiva da magnetização. Rosensweig (1985) mostra as alterações na equação de Cauchy com o tensor de tensões de um fluido base Newtoniano (Navier-Stokes incompressível) somado ao efeito de tensões magnéticas (tensor de Maxwell). Neste cenário uma força extra surge na equação do momento linear associada às forças de superfícies magnéticas atuantes em uma partícula infinitesimal do fluido contínuo equivalente. Esta força magnética por unidade de volume é dada por $\mu_0 \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}$, em que μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo e \mathbf{M} e \mathbf{H} denotam os campos vetoriais de magnetização e o campo magnético externo aplicado.

Desta forma a descrição do movimento de um fluido magnético sobre uma geometria de contorno sólida qualquer na condição em que campos magnéticos são aplicados sobre o fluido em escoamento exige a determinação dos campos vetoriais \mathbf{M} e \mathbf{H} . Pela equação de Ampère, no regime magnetostático, no qual não existe fluxo de corrente no fluido, já que este não é um fluido condutor e na ausência de campos elétricos, têm-se que o campo magnético \mathbf{H} é irrotacional, de modo que este pode ser expresso em termos do gradiente de um potencial magnético Φ_m , de modo que $\mathbf{H} = -\nabla \Phi_m$.

Como o campo induzido em determinado ponto do espaço é na verdade uma combinação dos efeitos de um campo aplicado e do estado de polarização do meio expresso em termos da magnetização do fluido, têm-se que $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H})$ em que \mathbf{B} é o campo induzido. A lei de Gauss do magnetismo, uma das quatro equações de Maxwell, expressa a inexistência de monopolos magnéticos através da afirmação de que o campo induzido por um ímã permanente possui fluxo magnético líquido nulo através de uma superfície Gaussiana fechada posicionada de forma arbitrária no espaço. Este princípio é expresso em termos matemáticos através da afirmação de que o campo induzido \mathbf{B} é um campo solenoidal, ou seja, possui divergente nulo, de modo que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. Desta

forma é possível escrever uma equação diferencial parcial de segundo grau para expressar o potencial magnético em termos do campo de magnetização como $\nabla^2\Phi_m = \nabla \cdot \mathbf{M}$.

Desta forma a determinação das forças magnéticas por unidade de volume que surgem na equação do movimento do fluido é uma questão de determinação do campo de magnetização do escoamento de um fluido magnético, já que

$$\mu_0 \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H} = -\mu_0 \mathbf{M} \cdot (\nabla \nabla \Phi_m) \quad \text{com} \quad \nabla^2 \Phi_m = \nabla \cdot \mathbf{M}.$$

O problema de fechamento passa então pela busca de uma equação diferencial pautada em princípios físicos do eletromagnetismo e da hidrodinâmica capaz de reger o campo de magnetização de um fluido magnético em escoamento. Para condições de suspensões magnéticas estacionárias a magnetização do fluido é chamada de *magnetização de equilíbrio* \mathbf{M}_0 da suspensão. Atualmente existem modelos baseados no comportamento microestrutural de suspensões magnéticas capazes de fornecer informações sobre as curvas de \mathbf{M}_0 em função basicamente da fração volumétrica das partículas ϕ e do parâmetro adimensional α , que fornece uma relação entre a energia média associada ao efeito do campo magnético sobre as partículas e a energia média das flutuações induzidas por movimento Browniano. Este parâmetro é definido como

$$\alpha = \frac{\mu_0 m H}{k_B T},$$

em que m denota a intensidade do momento de dipolo médio de uma partícula imersa em uma suspensão magnética. Os modelos de magnetização de equilíbrio existentes não levam em conta as interações hidrodinâmicas entre as partículas que compõem a suspensão magnética e só são válidos para fluidos em repouso. O presente trabalho além de propor uma equação evolutiva para a magnetização do fluido em escoamento, levando em conta efeitos como difusão e convecção de magnetização, além da influência da vorticidade do escoamento no campo de magnetização do fluido, também aborda através de simulações computacionais na escala das partículas a influência de interações hidrodinâmicas no comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão.

Uma discussão muito rica será apresentada em seções futuras sobre como podemos utilizar a equação de balanço de momento angular para um fluido magnético assimétrico para fortalecer o problema de fechamento e como esta equação se relaciona ao campo de magnetização do fluido em movimento. Nesta abordagem será mostrado o surgimento de uma nova constante material de caracterização do fluido associada ao efeito magnetoviscoso e será fornecido um exemplo da medição desta propriedade no

Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia do Grupo Vortex da Universidade de Brasília.

Em seguida é feita uma análise da dinâmica de duas partículas que interagem magneticamente e hidrodinamicamente. Esta parte do trabalho permite avaliar a dinâmica de suspensões diluídas de partículas esféricas de material ferro-magnético que interagem magneticamente. Através do problema de duas partículas é possível inferir uma série de informações sobre os parâmetros físicos que dominam a dinâmica de suspensões magnéticas diluídas, tanto coloidais quanto não coloidais. Por se estudar o problema com apenas duas partículas, é possível trabalhar em maiores detalhes todas as forças envolvidas. O foco do estudo da dinâmica de sistemas particulados magnéticos diluídos através do problema de duas partículas consistirá na tentativa de compreender como a dinâmica rotacional das partículas influencia na estabilidade da suspensão, mais precisamente nas taxas de agregação e dispersão hidrodinâmicas associadas à interações magnéticas.

Ainda na parte micro, a presente tese investiga o comportamento de suspensões magnéticas brownianas e não brownianas, contendo diversas partículas que interagem magneticamente. Neste parte do trabalho o objetivo é entender os parâmetros que determinam a estabilidade da suspensão, a dinâmica da evolução de agregados para suspensões instáveis, as flutuações nas velocidades das partículas associadas com interações magnéticas, hidrodinâmicas e movimento browniano para a determinação de coeficientes de difusão hidrodinâmicos, magnéticos e *self-diffusion* e quantificar parâmetros físicos importantes de um fluido equivalente entrando na escala da partícula, como uma pressão de partícula, por exemplo.

Finalmente será apresentado um estudo extenso sobre a influência das interações hidrodinâmicas, geralmente desprezadas em estudos de sistemas particulados magnéticos do ponto de vista microestrutural. Esta investigação permitirá a proposição de um novo modelo de magnetização de equilíbrio para suspensões magnéticas, mais completo, válido não só para suspensões coloidais de nanopartículas como para **SMR** de micropartículas.

PARTE I

Hidrodinâmica de fluidos magnéticos - Uma abordagem macroscópica

Os seguintes tópicos serão abordados nesta parte do trabalho:

- Estudo completo e detalhado das equações de balanço da ferrohodinâmica;
- Investigações acerca da equação do momento angular para fluido assimétricos;
- Proposta de uma nova equação evolutiva para a magnetização de um fluido magnético em movimento;
- Discussão sobre o efeito magnetoviscoso;
- Considerações finais sobre o cenário completo de equações diferenciais parciais que regem os principais campos das grandezas físicas associadas à descrição da hidrodinâmica de fluidos magnéticos assimétricos na presença de um campo externo aplicado;

Capítulo 2 EQUAÇÕES DE BALANÇO PARA FLUIDOS MAGNÉTICOS

Nessa seção pretende-se mostrar o cenário completo das equações diferenciais parciais que regem o comportamento de fluidos magnéticos em escoamento. Para tanto define-se inicialmente o contexto no qual as equações de Maxwell do Eletromagnetismo são utilizadas para a modelagem do escoamento de fluidos magnéticos através da abordagem da Ferrohidrodinâmica. Em seguida são discutidas as alterações necessárias na equação de Cauchy para torná-la adequada à modelagem do escoamento de ferrofluidos na presença de campo. Posteriormente são discutidas as alterações na equação da energia e em seguida é feita uma análise detalhada da questão da assimetria do tensor de tensões para fluidos polares, desenvolvendo uma equação evolutiva para a velocidade angular das partículas nanométricas que compõe o ferrofluido e finalmente as possibilidades de modelagem do campo de magnetização e sua relação com o acoplamento entre as equações de Maxwell do eletromagnetismo e as equações da hidrodinâmica é discutida. Desta forma espera-se documentar de forma completa todo o modelo envolvido para a modelagem e simulações computacionais (CFD) na área de ferrohidrodinâmica.

2.1 As equações de Maxwell

As leis que governam o eletromagnetismo são representadas por um sistema de quatro equações diferenciais parciais, que formam as conhecidas equações de Maxwell do eletromagnetismo (Grant e Phillips, 1990). São estas: a lei de Gauss da eletricidade, a lei de Gauss do magnetismo, a lei de Faraday e a lei de Ampère-Maxwell.

A lei de Gauss da eletricidade postula que uma densidade de carga contida no interior de uma região regular induz um fluxo líquido de campo elétrico através de qualquer superfície que englobe a distribuição de cargas de somatório não-nulo. Portanto:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_c}{\epsilon_0}, \quad (2.1)$$

em que $\nabla = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ em coordenadas cartesianas, ρ_c é a densidade volumétrica de carga e $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{C}^2/\text{N} \cdot \text{m}^2$ é a permissividade elétrica do vácuo. No caso de $\rho_c = 0$, o campo elétrico é solenoidal:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0. \quad (2.2)$$

A lei de Gauss do magnetismo estabelece que o fluxo de indução magnética que atravessa uma superfície fechada é nulo. Esta lei é consequência direta do fato de que não existe o monopolo magnético, ou ainda fontes e sorvedouros de \mathbf{B} . Deste modo, as linhas de indução magnética que atravessam uma superfície gaussiana são fechadas, implicando que nenhuma linha de campo é criada ou termina no interior desta superfície. A lei de Gauss do magnetismo é dada por:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 . \quad (2.3)$$

A Indução Magnética \mathbf{B} é um campo vetorial definido em termos do campo \mathbf{H} e da magnetização \mathbf{M} como sendo o produto da soma $\mathbf{H} + \mathbf{M}$ pela permeabilidade magnética do espaço livre $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{H} \cdot \text{m}^{-1}$:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) , \quad (2.4)$$

se utilizarmos a hipótese de um fluido superparamagnético, dada por $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$, temos:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (1 + \chi) \mathbf{H} . \quad (2.5)$$

Definindo $\mu = \mu_0 (1 + \chi)$ como sendo a permeabilidade magnética do meio e κ_m a permeabilidade relativa:

$$\kappa_m = \frac{\mu}{\mu_0} , \quad (2.6)$$

tem-se portanto:

$$\mathbf{M} = (\kappa_m - 1) \mathbf{H} = \chi \mathbf{H} \quad (2.7)$$

e:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (1 + \chi) \mathbf{H} = \mu \mathbf{H} . \quad (2.8)$$

No espaço livre (ou vácuo), a magnetização se anula desde que $\kappa_m = 1$ ou ainda $\chi = 0$. Nesse caso, não existem dipolos magnéticos para serem alinhados com o campo ($\mathbf{M} = \mathbf{0}$). De (2.4), a condição $\kappa_m = 1$ leva a:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} . \quad (2.9)$$

A lei da indução de Faraday estabelece uma relação entre o campo elétrico e o campo magnético. É possível gerar um campo elétrico (ou mesmo uma força eletromotriz de corrente) por meio da variação temporal local de um vetor indução. Um processo de geração de energia elétrica usa desse princípio. A lei da indução de Faraday pode ser expressa em sua forma diferencial como:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} . \quad (2.10)$$

A lei de Ampère-Maxwell, por sua vez, estabelece que um campo magnético tanto pode ser gerado por uma corrente elétrica como pela variação temporal local de um campo elétrico. A lei estabelece uma relação entre o campo magnético e o campo elétrico, bem como uma relação entre esses campos e cargas elétricas em movimento.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2.11)$$

em que \mathbf{J} representa a densidade de corrente (A/m²).

2.2 Limite Magnetostático de Maxwell

O regime magnetostático de Maxwell impõe que os efeitos magnéticos relativos ao movimento de cargas elétricas e a presença de campos elétricos são de pequena ordem de magnitude, portanto podem ser desprezadas.

$$\mathbf{E} = \mathbf{0}; \quad (2.12)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{0}; \quad (2.13)$$

Nestas condições, as equações de Maxwell reduzem-se para:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0; \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0; \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0}; \quad (2.15)$$

A aproximação de regime magnetostático, do ponto de vista prático para um fluido magnético, é válida para condição em que as partículas magnéticas dispersas no meio fluido são revestidas com uma camada de material isolante que inibe a condução de corrente elétrica.

No estudo da hidrodinâmica de fluidos magnéticos, o efeito de campos elétricos não é considerado uma vez que o foco principal é voltado para as forças de origem magnética proporcionais ao gradiente de campo magnético.

2.3 O Tensor de Maxwell

Uma das etapas fundamentais na obtenção de um sistema de equações fechado que represente o comportamento de escoamentos de fluidos magnéticos, do ponto de vista da

ferrohidrodinâmica é a busca por uma equação constitutiva para o fluido magnético. Diferentemente de equações de balanço ou conservativas, equações constitutivas não são deduzidas e sim propostas com base em alguma realidade física, atendendo às premissas do formalismo constitutivo impostas pela mecânica dos meios contínuos. Uma formulação muito utilizada para a modelagem do tensor de tensões magnéticas de um ferrofluido consiste no tensor de Maxwell, no qual se desenvolve uma formulação para o tensor magnético no vácuo e depois estende-se esta formulação para um meio contínuo, no caso um fluido magnético.

Sabe-se que a força magnética exercida em um ponto do espaço livre devido à presença de um campo magnético aplicado é dada por

$$\mathbf{f}_m = \mu_0 \mathbf{H} \nabla \cdot \mathbf{H} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m, \quad (2.16)$$

considere agora a seguinte identidade vetorial

$$\nabla \cdot (\mathbf{H}\mathbf{H}) = \mathbf{H} (\nabla \cdot \mathbf{H}) + \mathbf{H} \cdot (\nabla \mathbf{H}), \quad (2.17)$$

de modo que

$$\mathbf{H} (\nabla \cdot \mathbf{H}) = \nabla \cdot (\mathbf{H}\mathbf{H}) - \mathbf{H} \cdot (\nabla \mathbf{H}), \quad (2.18)$$

utilizando agora a seguinte identidade vetorial

$$\mathbf{H} \cdot (\nabla \mathbf{H}) = \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{H} \right) - \mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{H}), \quad (2.19)$$

no limite magnetostático têm-se que $\nabla \times \mathbf{H} = 0$, de modo que

$$\mathbf{f}_m = \mu_0 \mathbf{H} \nabla \cdot \mathbf{H} = \nabla \cdot (\mu_0 \mathbf{H}\mathbf{H}) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mu_0 H^2 \mathbf{I} \right), \quad (2.20)$$

que pode ser escrita como

$$\mathbf{f}_m = \nabla \cdot (\mu_0 \mathbf{H}\mathbf{H}) - \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mu_0 H^2 \mathbf{I} \right), \quad (2.21)$$

ou seja

$$\boldsymbol{\sigma}_m = -\frac{1}{2} \mu_0 H^2 \mathbf{I} + \mu_0 \mathbf{H}\mathbf{H} = -p_m \mathbf{I} + \mu_0 \mathbf{H}\mathbf{H}, \quad (2.22)$$

em que p_m denota uma pressão magnética, que vale $1/2 \mu_0 H^2$. Note que $\mu_0 \mathbf{H}$ equivale ao campo vetorial indução magnética \mathbf{B} em um meio sem capacidade de polarização na presença de um campo, ou seja, no vácuo. A fim de generalizar a expressão obtida na equação (2.22) para um meio contínuo, têm-se que

$$\boldsymbol{\sigma}_m = -\frac{1}{2} \mu_0 H^2 \mathbf{I} + \mathbf{B}\mathbf{H}. \quad (2.23)$$

2.4 A equação do movimento para um fluido magnético

O problema de um fluido magnético em movimento acopla as equações hidrodinâmicas com as equações magnéticas para \mathbf{H} , \mathbf{B} e \mathbf{M} . Assume-se, inicialmente, o fluido incompressível. Deste modo, a equação da continuidade se reduz a:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.24)$$

em que \mathbf{u} é o campo de velocidade Eulerino. A equação da quantidade de movimento para um meio contínuo, equação de Cauchy, é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.25)$$

em que ρ é a massa específica do fluido, \mathbf{g} é o vetor aceleração gravitacional e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões que, no presente contexto, é escrito como a soma das contribuições hidrodinâmicas e magnéticas no escoamento:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_h + \boldsymbol{\sigma}_m. \quad (2.26)$$

Na equação (2.26), $\boldsymbol{\sigma}_h$ e $\boldsymbol{\sigma}_m$ se referem ao tensor de tensões hidrodinâmico e ao tensor magnético respectivamente.

A equação constitutiva para o tensor de tensões hidrodinâmico em um fluido newtoniano e incompressível é dada por:

$$\boldsymbol{\sigma}_h = -p_h \mathbf{I} + 2\eta \mathbf{D}, \quad (2.27)$$

em que \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação correspondente à parte simétrica do tensor $\nabla \mathbf{u}$, dada por:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T). \quad (2.28)$$

O índice (T) refere-se ao operador transposto. Na equação (2.27), p_h denota a pressão estática do fluido. O tensor de tensões magnético $\boldsymbol{\sigma}_m$ é definido como (Rosensweig, 1985 e Cunha e Sobral, 2004):

$$\boldsymbol{\sigma}_m = -p_m \mathbf{I} + \mathbf{B} \mathbf{H}, \quad (2.29)$$

em que a variável p_m é a de pressão magnética, dada em termos do campo magnético como:

$$p_m = \frac{1}{2} \mu_o (\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}). \quad (2.30)$$

A pressão mecânica \mathcal{P} do escoamento é, por definição:

$$\mathcal{P} = -\frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma}). \quad (2.31)$$

Substituindo (2.27) e (2.29) em (2.26) e usando o resultado para substituir em (2.31), chega-se à seguinte expressão para a pressão mecânica:

$$\mathcal{P} = p_h + p_m - \frac{1}{3}\mathbf{B} \cdot \mathbf{H}. \quad (2.32)$$

Num contexto de mecânica dos meios contínuos, é comum escrever um tensor de 2ª ordem em termos de uma parte isotrópica do tipo $\mathcal{P}\mathbf{I}$ e uma parte deviatória $\boldsymbol{\sigma}^d$, cujo traço é identicamente nulo. Desta maneira, $\boldsymbol{\sigma}$ pode ser reescrito como:

$$\boldsymbol{\sigma} = -\mathcal{P}\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}^d. \quad (2.33)$$

A parte deviatória de $\boldsymbol{\sigma}$ é dada então por:

$$\boldsymbol{\sigma}^d = 2\eta\mathbf{D} + \mathbf{B}\mathbf{H} - \frac{1}{3}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{H})\mathbf{I}. \quad (2.34)$$

Note que, tomando o traço de (2.33), a definição de $\mathcal{P} = tr(\boldsymbol{\sigma}/3)$ é recuperada.

Substituindo (2.27) e (2.29) em (2.25) por meio de (2.26) e tomando o divergente de $\boldsymbol{\sigma}$, chega-se finalmente à equação de balanço da quantidade de movimento para um fluido magnético:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mu_0 \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}, \quad (2.35)$$

em que $p = \mathcal{P} - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{z}$ é a pressão mecânica modificada pela gravidade, que leva em consideração os efeitos hidrostáticos.

2.5 A equação da energia para um ferrofluido

Um ponto de partida interessante para a dedução da equação da energia para um meio contínuo qualquer, consiste na dedução da equação em termos da energia interna. Esta metodologia é comumente utilizada no contexto da mecânica dos meios contínuos (Chandrasekharaiah e Debnath, 1994 e Cunha, 2010). Quando se observa o comportamento das moléculas que compõe um meio contínuo, sabe-se que as mesmas possuem energia cinética associada ao movimento e que suas velocidades podem ser decompostas em termos de uma velocidade média somada a uma flutuação de velocidade. Definimos desta forma a energia interna como sendo um termo de energia associado à flutuações

de velocidade na escala molecular, de modo que a energia total e um ponto material do contínuo pode ser expressa como

$$E_T = E_c + E_i \quad (2.36)$$

em que E_T representa a energia total, E_c é um termo associado à energia cinética do ponto material do contínuo e E_i representa a energia interna neste ponto. Do ponto de vista da primeira lei da termodinâmica, para um processo com geração de energia interna, podemos escrever

$$\frac{DE_T}{Dt} = \left(\begin{array}{c} \text{taxa de trabalho sobre} \\ \text{o volume material} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{taxa de calor através} \\ \text{das superfícies materiais} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{taxa de geração interna} \\ \text{no volume material} \end{array} \right),$$

com $E_T = E_c + E_i$ e

$$E_c = \int_v \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV \quad \text{e} \quad E_i = \int_v \rho e dV, \quad (2.37)$$

em que e representa a energia interna específica no ponto material considerado. Desta forma podemos escrever o balanço de energia dado pela primeira lei da termodinâmica como

$$\frac{D}{Dt} \int_v \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \rho e \right) dV = \dot{E}_c + \dot{E}_s + \dot{E}_d + \dot{E}_g, \quad (2.38)$$

na equação (2.38) o termo \dot{E}_c representa a potência das forças de campo, \dot{E}_s representa a potência das forças de superfície, \dot{E}_d representa a taxa de calor associada à difusão molecular, representando o balanço líquido dos fluxos difusivos de calor que entram e saem da superfície do volume material e \dot{E}_g representa a geração interna de energia no interior do volume material. Cada termo é modelado como

$$\dot{E}_c = \int_v \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{b} dV = \int_v \rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{b}) dV \quad (2.39)$$

$$\dot{E}_s = \int_s \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} dS = \int_s \mathbf{u} \cdot (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dS = \int_s (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \int_v \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) dV \quad (2.40)$$

$$\dot{E}_d = - \int_s \mathbf{q}'' \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = - \int_v \nabla \cdot \mathbf{q}'' dV, \quad (2.41)$$

$$\dot{E}_g = \int_v \rho \dot{e} dV, \quad (2.42)$$

utilizando a seguinte identidade

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} \quad (2.43)$$

e combinando as equações (2.39),(2.40) e (2.41) com a equação (2.38) têm-se

$$\frac{D}{Dt} \int_v \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \rho e \right) dV = \int_v \left[\rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{b}) + \mathbf{u} \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q}'' + \rho \dot{\epsilon} \right] dV, \quad (2.44)$$

utilizando o Teorema do Transporte de Reynolds, a equação de Cauchy e o teorema da localização para um meio contínuo, pode-se escrever a equação (2.44) após algumas manipulações algébricas como

$$\rho \frac{De}{Dt} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q}'' + \rho \dot{\epsilon}, \quad (2.45)$$

utilizando a lei de Fourier como equação constitutiva para o fluxo de calor por condução e relações termodinâmicas entre energia interna e temperatura, pode-se escrever a equação (2.45) como

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + k \nabla^2 T + \rho \dot{\epsilon}, \quad (2.46)$$

utilizando a equação constitutiva para $\boldsymbol{\sigma}$ fornecida na seção anterior, aplicada já a um fluido magnético, temos que a versão final da equação da energia se torna

$$\frac{DT}{Dt} = \alpha \nabla^2 T + \frac{2\eta}{\rho C_p} (\mathbf{D} : \mathbf{D}) + \frac{1}{\rho C_p} \mathbf{B}\mathbf{H} : \mathbf{D} + \frac{1}{\rho C_p} \mathbf{B}\mathbf{H} : \mathbf{W} + \rho \dot{\epsilon}, \quad (2.47)$$

em que

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \quad (2.48)$$

é o tensor taxa de rotação. Desprezando o termo de dissipação viscosa $2\eta(\mathbf{D} : \mathbf{D})$ do escoamento e efeitos de campo magnético no campo de temperatura, temos que a equação da energia pode ser escrita em termos de:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{\alpha} \nabla^2 T, + \rho \dot{\epsilon} \quad (2.49)$$

em que T é a temperatura absoluta e α é a difusividade térmica da suspensão. Por meio de (2.49), para um dado campo de velocidade \mathbf{u} , é possível conhecer a distribuição de temperatura no escoamento.

2.6 A equação da entropia para um fluido magnético

Partindo da primeira relação de Gibbs da termodinâmica, têm-se que

$$T ds = de + p dv = de - \frac{P}{\rho^2} d\rho, \quad (2.50)$$

esta equação pode ser escrita em termos de derivadas materiais, de modo que a versão para escoamentos da primeira lei de Gibbs da termodinâmica é da da porque

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = \rho \frac{De}{Dt} - \frac{P}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, \quad (2.51)$$

mas da equação da continuidade têm-se que

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, \quad (2.52)$$

de modo que

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = \rho \frac{De}{Dt} + p \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.53)$$

utilizando a equação do balanço térmico, (2.45), têm-se que

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + p \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q}'' + \rho \dot{\epsilon}. \quad (2.54)$$

A equação (2.54) representa o princípio geral da entropia para um meio contínuo em movimento. Para aplicar esta equação a um fluido magnético recorre-se às equações constitutivas para $\boldsymbol{\sigma}$ e \mathbf{q}'' . Utilizando a lei de Fourier como equação constitutiva para o fluxo de calor e o tensor de tensões de um fluido Newtoniano incompressível acrescentado do tensor de Maxwell para fluidos magnéticos, considerando ainda que o escoamento é incompressível, têm-se que o balanço de entropia para um fluido magnético pode ser dado por

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = (2\mu \mathbf{D} + \mathbf{B}\mathbf{H}) : \mathbf{D} + \mathbf{B}\mathbf{H} : \mathbf{W} + k \nabla^2 T + \rho \dot{\epsilon}. \quad (2.55)$$

2.7 O Potencial Magnético

A equação do momento linear estabelece a existência de uma força magnética que acopla o magnetismo à hidrodinâmica. Esta força é dada por $\mu_0 \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}$. Uma vez que \mathbf{H} é um campo irrotacional e conservativo, define-se o potencial de campo magnético ϕ_m tal que:

$$\mathbf{H} = -\nabla \phi_m. \quad (2.56)$$

Substituindo (2.4) em (2.3), e usando o fato de que \mathbf{H} agora é expresso em termos de ϕ_m (2.56), chega-se a uma equação do tipo Poisson para o potencial magnético:

$$\nabla^2 \phi_m = -\nabla \cdot \mathbf{M}. \quad (2.57)$$

A equação (2.57) representa uma equação do tipo Poisson para o potencial magnético. A fim de que a magneto-estática seja finalmente acoplada com a hidrodinâmica, deve-se determinar uma equação evolutiva para o campo de magnetização.

2.8 Condições de Contorno para Campos Magnéticos

As condições de contorno para potencial magnético são decorrentes das equações (2.3) e (2.15). Nos problemas teste deste trabalho, um campo magnético externo ao domínio de interesse (no caso, o fluido magnético) é previamente conhecido ou imposto. Deste modo, os valores de \mathbf{H}_0 e de \mathbf{B}_0 (campo magnético e indução magnética externos) são conhecidos. É necessário, no entanto, especificar a condição de contorno na fronteira do domínio com o meio externo em função de \mathbf{H}_0 e \mathbf{B}_0 . Conhecendo-se a condição de contorno em \mathbf{H} na fronteira, é possível estabelecer uma condição do tipo Neumann para o potencial magnético.

Considera-se inicialmente dois meios magnéticos com diferentes permeabilidades μ_1 e μ_2 , respectivamente. Integra-se a equação (2.3) em um volume arbitrário do domínio contendo os dois meios. Aplicando-se o Teorema da Divergência de Gauss para transformar a integral de volume em uma integral de superfície, tem-se:

$$\int_{\delta V} \nabla \cdot \mathbf{B} \, dV = \int_{\delta S} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0. \quad (2.58)$$

Tomando o cilindro indicado na figura (2.1a), nota-se que:

$$\delta V = \varepsilon \pi a^2 \quad (2.59)$$

em que $a = D/2$, e:

$$\delta S = 2\pi a \varepsilon. \quad (2.60)$$

Como $\varepsilon \ll a$, termos $O(a^2)$ dominam sobre os de $O(\varepsilon a)$. Deste modo, a integral na superfície lateral do cilindro é muito menor que as integrais nas superfícies superior e inferior. Portanto, a integral em δS na equação (2.58) leva a:

$$\mathbf{B}_2 \cdot \mathbf{n} - \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.61)$$

ou ainda:

$$\mathbf{B}_{2n} - \mathbf{B}_{1n} = 0. \quad (2.62)$$

Nota-se que a componente normal do vetor indução magnética é contínua na interface de separação dos dois meios magnéticos.

Da equação (2.15), impõe-se uma segunda condição de contorno magnética. Integrando-se (2.15) sobre uma superfície na interface e aplicando-se o teorema de Stokes sobre um caminho englobando a interface, para transformar a integral de superfície em uma integral de linha de segunda espécie, tem-se:

$$\int_S (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \oint_L \mathbf{H} \cdot \mathbf{t} \, dL = 0, \quad (2.63)$$

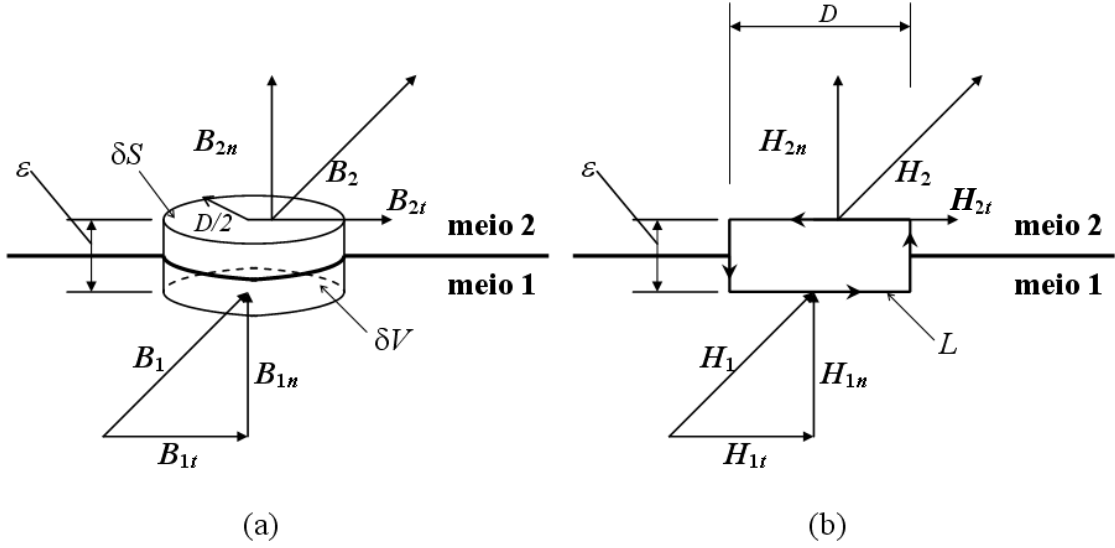


Figura 2.1: Condições de contorno na interface de dois materiais distintos. Em (a), a representação para a indução magnética e em (b), o esquema para o campo magnético (ilustração cedida por Sobral, Y. D., do original Sobral, 2002)

em que \mathbf{t} é vetor tangente ao caminho L . No caminho indicado na figura (2.1) $D \gg \varepsilon$. Assim, as integrais em ε do caminho L são muito menores que as integrais em D . Desse modo, da integral sobre o caminho fechado L da equação (2.63), chega-se a:

$$\mathbf{H}_2 \cdot \mathbf{t} - \mathbf{H}_1 \cdot \mathbf{t} = (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \cdot \mathbf{t} = 0, \quad (2.64)$$

ou ainda, pode-se escrever a condição de contorno acima em termos de:

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{0}. \quad (2.65)$$

Desse modo, verifica-se que a componente do campo magnético tangencial à superfície é conservada.

2.9 O problema da assimetria do tensor de tensões

Sabe-se que a equação constitutiva para o tensor de tensões de um fluido Newtoniano não-polar garante um tensor simétrico $\boldsymbol{\sigma}$, de modo que

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T, \quad (2.66)$$

na presença de torques magnéticos o tensor de tensões se torna assimétrico e isto é uma consequência direta do balanço do momento angular para um fluido polar. Para

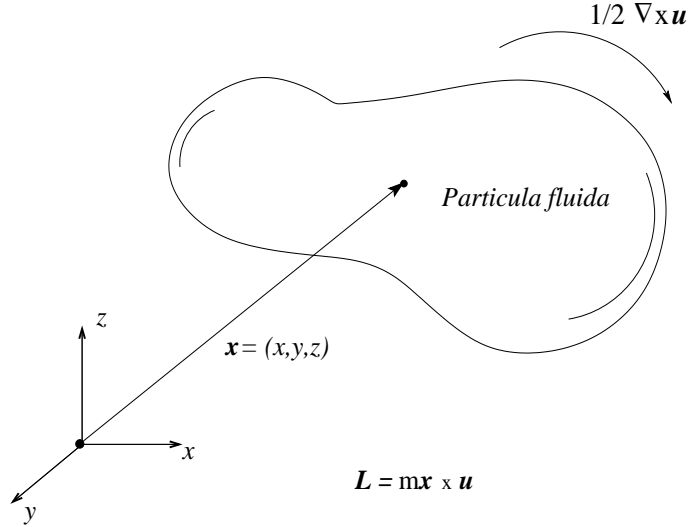


Figura 2.2: Partícula fluida sobre a ação de torques. Da cinemática de fluidos sabe-se que a velocidade angular da partícula fluida equivale à metade da vorticidade do escoamento no centro da partícula.

exemplificar esta questão considere uma partícula fluida sob a ação de torques de acordo com a figura (2.2).

A equação do torque para esta partícula fluida infinitesimal é dada por

$$\frac{D\mathbf{L}}{Dt} = \sum \mathbf{T}, \quad (2.67)$$

em que \mathbf{L} representa o momento da quantidade de movimento da partícula e \mathbf{T} contabiliza os torques que agem sobre o elemento fluido infinitesimal. Por definição o momento angular \mathbf{L} é expresso por

$$d\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \rho \mathbf{u} dV \quad (2.68)$$

e

$$\mathbf{L} = \int_V \mathbf{x} \times \rho \mathbf{u} dV, \quad (2.69)$$

desta forma têm-se que

$$\frac{D}{Dt} \left(\int_V (\mathbf{x} \times \rho \mathbf{u}) dV \right) = \int_V \rho \frac{D}{Dt} (\mathbf{x} \times \mathbf{u}) dV = \sum \mathbf{T}. \quad (2.70)$$

Note que na equação (2.70) fui utilizado o teorema do transporte de Reynolds para avaliar a integral do lado esquerdo da equação. Os torques que agem sobre uma partícula fluida podem ser decompostos em torques das forças de campo e das forças de superfície da seguinte forma

$$\sum \mathbf{T} = \int_S \mathbf{x} \times \mathbf{t} dS + \int_V (\mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} + \rho \mathbf{T}^m) dV \quad (2.71)$$

em que \mathbf{t} é o vetor de tensões atuando na superfície do elemento, \mathbf{b} representa as forças de campo por unidade de massa que atuam sobre a partícula e \mathbf{T}^m representa o torque magnético sobre a mesma por unidade de massa. Desta forma, combinando as equações (2.70) e (2.71), têm-se que

$$\int_V \rho \frac{D}{Dt} (\mathbf{x} \times \mathbf{u}) dV = \int_S \mathbf{x} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dS + \int_V (\mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} + \rho \mathbf{T}^m) dV, \quad (2.72)$$

aplicando o teorema da divergência para a integral de superfície que surge no lado direito da equação temos:

$$\int_S \mathbf{x} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dS = \int_V [\mathbf{x} \times (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}] dV, \quad (2.73)$$

em que $\boldsymbol{\epsilon}$ é o tensor isotrópico de terceira ordem, definido com base no permutador de Levi-Cevita da forma

$$\boldsymbol{\epsilon} = \epsilon_{ijk} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \hat{\mathbf{e}}_k = \hat{\mathbf{e}}_k \cdot (\hat{\mathbf{e}}_i \times \hat{\mathbf{e}}_j), \quad (2.74)$$

substituindo a expressão (2.73) em (2.72) têm-se que

$$\int_V \left[\mathbf{x} \times \left(\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{b} \right) + \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{T}^m \right] dV = \mathbf{0}, \quad (2.75)$$

o termo que surge entre parênteses na equação (2.75) é igual a zero, de acordo com a equação de Cauchy, desta forma temos que

$$\int_V [\boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{T}^m] dV = \mathbf{0}, \quad (2.76)$$

aplicando o teorema da localização à equação (2.76) têm-se que

$$\boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{T}^m, \quad (2.77)$$

a equação (2.77) fornece uma informação muito importante. Ela nos diz que na presença de torques magnéticos o tensor de tensões deixa de ser simétrico. Note que o produto : entre um tensor antissimétrico, como o tensor $\boldsymbol{\epsilon}$, e um tensor simétrico é nulo. Na ausência de torques magnéticos isto ocorre, porém quando $\mathbf{T}^m \neq \mathbf{0}$ o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ deixa de ser simétrico, isto é

$$\boldsymbol{\sigma} \neq \boldsymbol{\sigma}^T. \quad (2.78)$$

Esta discussão mostra que para fluidos polares o tensor de tensões do meio não é mais simétrico, como no caso de fluidos Newtonianos.

2.9.1 Uma equação evolutiva para o momento angular

O objetivo agora é deduzir uma equação evolutiva para o momento angular das partículas fluidas. O ponto de partida de tal análise é a equação (2.79) que estabelece a

relação entre a variação do momento angular das partículas nanométricas que compõe um ferrofluido somado ao momento angular orbital da partícula fluida do contínuo com o somatório de torques atuantes sobre um ponto material do contínuo

$$\frac{D}{Dt} \int_v (\mathcal{T} + \mathbf{x} \times \mathbf{u}) dV = \sum \mathbf{T}, \quad (2.79)$$

na equação (2.79) \mathcal{T} representa o momento angular interno ou *spin* associado às partículas sólidas imersas no fluido carreador, enquanto que o termo $\mathbf{x} \times \mathbf{u}$ representa o que se chama de momento angular externo ou orbital, associado ao meio contínuo equivalente (fluido carreador + partículas ferromagnéticas nanométricas). Os torques serão separados entre torques associados à forças de campo e torques de forças de superfície, de modo que

$$\sum \mathbf{T} = \sum \mathbf{T}_b + \sum \mathbf{T}_s. \quad (2.80)$$

Os torques relacionados à forças de campo podem ser modelados como

$$\sum \mathbf{T}_b = \int_v \mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} dV, \quad (2.81)$$

em que o termo $\mathbf{x} \times \rho \mathbf{b}$ representa o torque das forças de campo por unidade de volume. A modelagem dos torques de superfície é feita através da soma de torques magnéticos associados à forças de superfície que surgem devido ao termo extra de tensões magnéticas com os torques das forças de superfícies associados ao vetor de tensões do fluido, de modo que

$$\sum \mathbf{T}_s = \int_s (\mathbf{c}_n + \mathbf{x} \times \mathbf{f}) dS, \quad (2.82)$$

em que

$$\mathbf{c}_n = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{C} \quad \text{e} \quad \mathbf{f} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.83)$$

na expressão (2.83) o termo \mathbf{C} representa um tensor de segunda ordem, conhecido como *couple stress tensor* e é modelado pela relação

$$\mathbf{C} = 2\eta' \mathbf{D}^* \quad \text{com} \quad \mathbf{D}^* = \frac{1}{2} [\nabla \boldsymbol{\omega} + (\nabla \boldsymbol{\omega})^T], \quad (2.84)$$

em que a constante material η' representa o efeito magneto-viscoso associado com a energia extra que o escoamento deve utilizar para desorientar as partículas magnéticas da direção de um campo externo e orientá-las na direção da vorticidade. É importante notar que o tensor \mathbf{C} é análogo ao tensor $\boldsymbol{\sigma}$ de um fluido Newtoniano com representantes no caso rotacional. Utilizando o teorema da divergência na integral do lado direito da equação (2.84) temos

$$\sum \mathbf{T}_s = \int_v [\nabla \cdot \mathbf{C} + \mathbf{x} \times (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}] dV, \quad (2.85)$$

combinando as equações (2.79),(2.80),(2.81) e (2.85) e realizando algumas manipulações algébricas, utilizando o Teorema do Transporte de Reynolds e o Teorema da Localização para um meio contínuo, chega-se na equação evolutiva do momento angular, dada por

$$\rho \frac{D\mathcal{T}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{C} - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.86)$$

Utilizando a equação constitutiva dada para o tensor \mathbf{C} têm-se

$$\rho \frac{D\mathcal{T}}{Dt} = \eta' \nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{\omega}) + \eta' \nabla^2 \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.87)$$

Utilizando a definição do momento angular de spin $\mathcal{T} = J\boldsymbol{\omega}$, em que J representa o momento de inércia polar das partículas nanométricas, temos

$$\rho J \frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = \eta' \nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{\omega}) + \eta' \nabla^2 \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.88)$$

Desprezando efeitos de dilatação angular, associados ao termo $\nabla \cdot \boldsymbol{\omega}$ e calculando o último termo da equação (2.88), temos que

$$\rho J \frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = \eta' \nabla^2 \boldsymbol{\omega} - \mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H} \quad (2.89)$$

A equação (2.89) expressa a variação material da velocidade angular das partículas que compõe o ferrofluido do ponto de vista do balanço do momento angular do fluido contínuo equivalente. Esta equação é de extrema importância no acoplamento da dinâmica das partículas com a equação evolutiva da magnetização do meio contínuo, que por sua vez está diretamente associada ao movimento do ferrofluido.

É importante notar que a equação (2.89) só possui sentido físico para um fluido magnético com tensor de tensões assimétrico. A equação (2.77) estabelece que torques magnéticos internos só estão presentes em fluidos assimétricos, de modo que para um fluido simétrico o termo $\mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H}$ é nulo. Além disso, a magnetoviscosidade η' só possui valor diferente de zero para ferrofluidos nos quais as partículas ferromagnéticas não encontram-se livres para girar no sentido da vorticidade, de modo que para um ferrofluido na ausência de torques magnéticos (simétrico) este efeito é nulo, sendo assim para um fluido simétrico a equação (2.89) estabelece simplesmente que a variação temporal de $\boldsymbol{\omega}$ é nula. Uma vez que o ferrofluido encontra-se inicialmente em repouso, com $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{0}$, a velocidade angular interna das partícula permanecerá nula ao longo do desenvolvimento do escoamento.

2.9.2 O efeito magnetoviscoso

Uma discussão mais aprofundada acerca do efeito magnetoviscoso é importante para a compreensão dos efeitos de fenômenos físicos microestruturais na reologia de

suspensões magnéticas na presença de campo. Quando um fluido magnético na presença de um campo externo é submetido a um cisalhamento simples em um dispositivo experimental de medição de viscosidade como um reômetro acoplado a uma célula magnética, a viscosidade medida pelo aparelho consiste em uma combinação de diferentes mecanismos físicos.

Primeiramente o próprio fluido base possui um coeficiente de difusão de quantidade de movimento associado à flutuações de velocidade na escala molecular, esta viscosidade do fluido base será denotada pela letra grega η_b . Além da viscosidade do fluido base, a simples presença de partículas rígidas produz um aumento neste coeficiente de difusão. Este aumento está associado ao fato das partículas serem indeformáveis, deste modo quando submetido a um esforço tangencial as partículas passam esta deformação para o fluido que gera um aumento no *stresslet* da suspensão ocasionando um aumento de viscosidade devido à própria presença de partículas rígidas, este aumento de viscosidade pode ser determinado para regimes infinitamente diluídos pela correção analítica de Einstein (1956) e será chamado de Δ_{η_e} . Este aumento da viscosidade por efeito da adição de partículas pode ser atribuído a uma produção de energia interna associada ao termo $(2\eta/\rho C_p)\mathbf{D} : \mathbf{D}$ na equação (2.47).

Quando uma suspensão de esferas de material ferromagnético é submetida à aplicação de um campo externo, a isotropia da distribuição de partículas da suspensão é quebrada e longas cadeias passam a ser formadas no interior do material. A partir do momento em que o cisalhamento é aplicado uma energia extra deve ser dispendida com o objetivo de deformar estas cadeias, o que leva a um aumento na viscosidade da suspensão, este aumento foi determinado por Shliomis (1972) e será denotado pela simbologia Δ_{η_s} . Este termo referente ao aumento da viscosidade por deformação de cadeias de partículas formadas devido à aplicação de um campo externo pode ser interpretado como um efeito da produção de energia interna extra associada ao termo $(1/\rho C_p)\mathbf{BH} : \mathbf{D}$ na equação (2.47).

Além do efeito de deformação de cadeias induzidas pela aplicação de um campo externo, se o fluido é assimétrico, ou seja, está sujeito à torques magnéticos internos, as partículas não se encontram livres para girar na direção da vorticidade do escoamento induzida pelo cisalhamento simples, de modo que uma energia extra deve ser utilizada para girar as partículas na direção da vorticidade, o que leva a um outro aumento na viscosidade do fluido associado ao efeito rotacional. Este aumento será denotado por Δ_{η_r} e está associado a uma produção de energia interna no fluido por ação do efeito

de rotação das partículas, vinculado ao termo $(1/\rho C_p)\mathbf{BH}:\mathbf{W}$ na equação (2.47).

Desta forma, a viscosidade efetiva da suspensão magnética sujeita a aplicação de um campo externo é dada por

$$\eta = \eta_b + \Delta_{\eta_e} + \Delta_{\eta_s} + \Delta_{\eta_r} \quad (2.90)$$

com

$$\Delta_{\eta_e} = \eta_b \left(\frac{5}{2} \phi \right) \quad \text{e} \quad \Delta_{\eta_s} = \eta \left[\frac{3}{2} \left(\frac{\alpha \mathcal{L}(\alpha)}{4 + 2\alpha \mathcal{L}(\alpha)} \right) \phi \right], \quad (2.91)$$

em que \mathcal{L} é a função Langevin definida por

$$\mathcal{L}(\alpha) = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha}, \quad (2.92)$$

dividindo a equação (2.90) por η_b , utilizando (2.91) e isolando Δ_{η_r} , obtém-se

$$\Delta_{\eta_r} = \eta - \eta_b - \left[\frac{5}{2} + \frac{3}{4} \frac{\alpha \mathcal{L}(\alpha)}{(2 + \alpha \mathcal{L}(\alpha))} \right] \phi \quad (2.93)$$

A figura (2.4) ilustra um exemplo de uma medição de viscosidade realizada no Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia do Grupo Vortex na Universidade de Brasília. O ferrofluido denominado utilizado é chamado de FCS1, este fluido foi sintetizado no Laboratório de Química dos Materiais da UFG. O FCS1 é composto por um fluido base é uma mistura de óleo naftênico com octadeceno (9:1) acrescido de óleo vegetal (1:1). A fração volumétrica de partículas é da ordem de $\phi \sim 0.9\%$. As partículas são compostas de maguemita, obtidas através da oxidação da magnetita e possuem diâmetros médios de $7.9nm$. Para fins de estabilização, as partículas são recobertas com ácido oléico. A figura (2.3) mostra o dispositivo experimental utilizado nas medições ilustradas em (2.4).

Pela figura (2.4) é possível observar um aumento significativo da viscosidade efetiva do fluido devido a ação de um campo externo aplicado. Em termos dimensionais o campo máximo aplicado é igual à $170kA/m$. O aumento percentual na viscosidade efetiva do fluido para a condição de campo máximo aplicado é de 14.8% . A figura (2.4) ilustra em termos dimensionais apenas o aumento na viscosidade do fluido. Observa-se que para α até 5, a contribuição da viscosidade de Shliomis é muito pequena e vale $\Delta_{\eta_s} = 0.2cP$. Já o aumento da viscosidade do fluido devido à presença de partículas é determinado pela viscosidade de Einstein (1956) válida para regimes infinitamente diluídos (neste caso $\phi \ll 1$) e vale $\Delta_{\eta_e} = 1.1cP$. A maior contribuição para o efeito da viscosidade rotacional devido ao efeito de campo magnético é $\Delta_{\eta_r} = 7.4cP$. Este resultado é um indicativo de que o fluido ensaiado é fortemente assimétrico, já que o efeito



Figura 2.3: Reômetro com célula magnética utilizado na medição da viscosidade de um fluido magnético na presença de campo. (a) Disco rotativo, (b) cápsula de blindagem desmontada (c), detalhe do compartimento no qual é alojada a bobina do aparato magnetoreológico e (d) fonte de corrente elétrica utilizada para a geração de campo magnético controlável através de um eletroímã.

da viscosidade rotacional está diretamente associado à presença de torques magnéticos internos atuantes na microestrutura do fluido. Percebe-se também uma tendência de um comportamento do tipo lei de potência para a representação da variação de Δ_{η_r} com relação ao parâmetro α .

É importante notar que o termo η' que aparece na equação (2.89) não é idêntico ao termo Δ_{η_r} , medido em laboratório através de um reômetro com célula magnética. A unidade de η' é de $[\text{Pa}]\cdot[\text{s}]\cdot[\text{m}^2]$, enquanto a unidade de medida de Δ_{η_r} é $[\text{Pa}]\cdot[\text{s}]$. A conversão da medida de Δ_{η_r} obtida em laboratório para o coeficiente de difusão de momento angular interno associado à assimetria do fluido na presença de campo magnético η' é dada por

$$\eta' = \Delta_{\eta_r} \times A \quad (2.94)$$

em que A denota a área de cisalhamento e depende do dispositivo de medição utilizado para a obtenção dos valores de Δ_{η_r} . Para o caso das medições realizadas no Laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia do Grupo Vortex um reômetro de disco rotativo foi utilizado, de modo que $A = \pi R^2$, em que R é o raio do disco utilizado para a produção de tensões cisalhantes necessárias para a geração do escoamento reométrico.

O problema descrito até o momento requer equações adicionais para a solução do acoplamento do campo de velocidades do escoamento \mathbf{u} com os campos vetori-

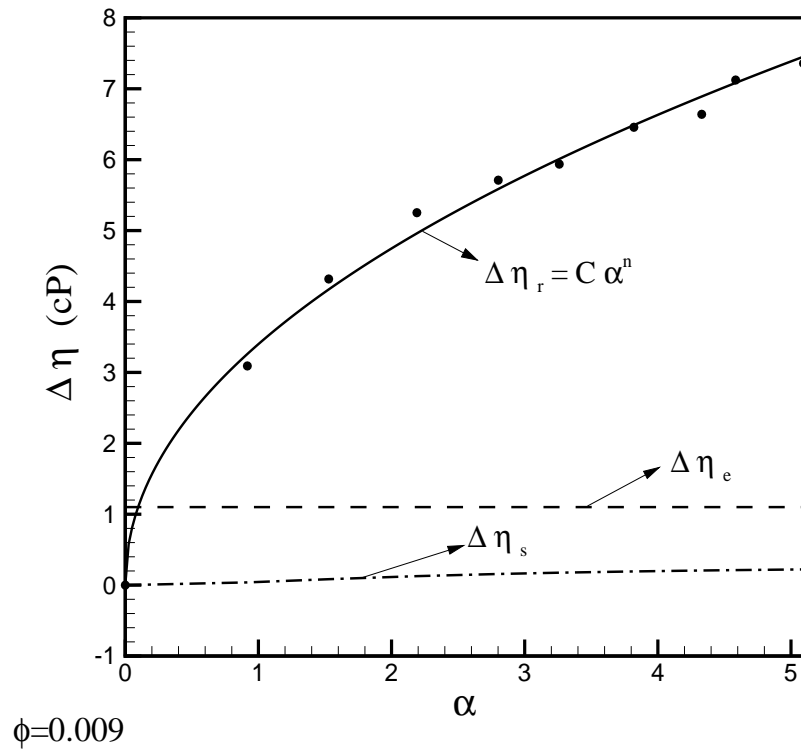


Figura 2.4: Contribuição da viscosidade rotacional comparada a de Einstein (1956) e Shliomis (1972) para um ferrofluido com $\phi = 0.009$ e α indo de 0 a 5. A linha cheia representa um ajuste de lei de potência, os pontos representam os valores experimentais para o efeito magnetoviscoso, a linha tracejada denota o aumento de viscosidade associado à correção ordem ϕ de Einstein e a linha traço-ponto representa a correção de Shliomis.

ais das grandezas magnéticas \mathbf{M} e \mathbf{H} . Uma vez que o campo magnético \mathbf{H} pode ser determinado a partir da equação de Poisson utilizando a formulação do potencial magnético, eq. (2.57), consequência direta da lei da indução de Faraday aplicada ao limite magneto-estático, resta agora propor uma equação evolutiva para determinar o campo de magnetização do ferrofluido em escoamento. Esta equação evolutiva é parte da solução do problema acoplado.

2.10 Modelos de equações evolutivas atuais

Existem alguns modelos disponíveis na literatura recente para a proposição de uma equação evolutiva para a magnetização. Felderhof (2001) discute diferentes equações da magnetização, incluindo o modelo pioneiro de Shliomis (1972). O modelo mais

comum utilizado atualmente propõe uma equação evolutiva dada por

$$\frac{D\mathbf{M}}{Dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} - \frac{1}{\tau_s} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_0), \quad (2.95)$$

na equação (2.95) o termo do lado esquerdo está associado à derivada material do campo vetorial magnetização, o primeiro termo do lado direito representa um transporte desta propriedade associado à rotação das partículas que compõe o fluido magnético e ao transporte de magnetização por ação da vorticidade do fluido, neste caso têm-se que $\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{\xi} \mathbf{M} \times \mathbf{H} + (1/2)(\nabla \times \mathbf{u})$, com $\xi = \frac{\rho J}{\tau_s \mu_0}$ e o último termo quantifica o quanto a magnetização do ferrofluido em escoamento se afasta da magnetização de equilíbrio, dada para um fluido em repouso, o termo τ_s representa uma escala associada ao tempo de relaxação magnética. O termo τ_s está associado ao tempo de relaxação magnética, tipicamente da ordem de 10^{-7} segundos para suspensões de nanopartículas (Osaci et al., 2007), que define uma escala de tempo já fora das escalas da mecânica dos meios contínuos. O termo J representa o momento de inércia polar médio das partículas magnéticas.

O termo associado à efeitos de assimetria do tensor de tensões que contabiliza contribuições da velocidade angular interna (de *spin*) das partículas ferromagnéticas que compõem o fluido magnético proposto por Shliomis (1972) é dado por $\frac{1}{\xi} \mathbf{M} \times \mathbf{H} \times \mathbf{M}$. Note que da equação do momento angular, eq.(2.89), é possível estabelecer a seguinte escala típica da velocidade angular de *spin* $\boldsymbol{\omega}$

$$\left| \rho J \frac{\boldsymbol{\omega}}{\tau_s} \right| \sim |\mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H}|, \quad (2.96)$$

de modo que

$$|\boldsymbol{\omega}| \sim \left| \left(\frac{\tau_s \mu_0}{\rho J} \right) \mathbf{M} \times \mathbf{H} \right|. \quad (2.97)$$

Note que a proposta da equação evolutiva da magnetização por Shliomis (1972) considera o efeito da velocidade angular interna das partículas ferromagnéticas através de uma escala característica de $\boldsymbol{\omega}$, expressa pela equação (2.97).

Uma proposta mais realista seria considerar ao invés de uma escala típica para a velocidade angular de spin $\boldsymbol{\omega}$ o próprio valor desta, determinado a partir da equação evolutiva do momento angular aplicado a um fluido polar com tensor de tensões não simétrico. A presente proposta é mais completa no sentido em que considera mais mecanismos físicos na determinação da velocidade angular de *spin*, associados à difusão de momento angular por ação do efeito magneto-viscoso e à torques internos devido ao não alinhamento entre o campo magnético aplicado e o campo de magnetização (efeito

da assimetria do tensor de tensões). De modo que a relação proposta utiliza a equação evolutiva (2.95) com $\Omega = \boldsymbol{\omega} + 1/2\nabla \times \mathbf{u}$ ao invés de $\frac{1}{\xi}\mathbf{M} \times \mathbf{H} \times \mathbf{M}$.

É importante notar que o termo \mathbf{M}_0 necessita ser modelado. Existem alguns modelos na literatura para se determinar a magnetização de equilíbrio de um ferrofluido em repouso. Em capítulos futuros da presente Tese uma discussão detalhada acerca de modelos de magnetização será tratada.

Um inconveniente do uso da equação (2.97) para a solução do movimento de um fluido magnético contínuo pautado por equações e princípios da mecânica dos meios contínuos é o *mixing* de escalas de tempo de diferentes contextos. Sabe-se que escalas de tempo associadas à fenômenos magnéticos são extremamente pequenas, muitas vezes fora da própria escala de tempo da mecânica dos meios contínuos. Desta forma soa um pouco estranho a inclusão de um tempo de relaxação magnética τ_s em meio a uma equação da mecânica dos meios contínuos.

2.11 Dedução de um novo modelo de magnetização baseado nas equações de Maxwell

Uma proposta mais recente, apresentada pela primeira vez de forma resumida por Cunha (2012) e agora acrescida de maiores detalhes e discussões no presente trabalho, consiste na dedução de uma equação evolutiva para a magnetização a partir das equações fundamentais do eletromagnetismo. Para isso, considere um elemento infinitesimal de um fluido magnético movendo-se com velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. No contexto de um fluido condutor em magnetohidrodinâmica o campo vetorial densidade de corrente $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$ é computado através da soma de duas contribuições: uma devido ao campo elétrico \mathbf{E} aplicado ao fluido condutor e outra devido ao campo elétrico induzido pelo movimento de cargas elétricas em um meio sujeito à aplicação de um campo magnético \mathbf{H} que pela própria magnetização \mathbf{M} do fluido gera um campo induzido \mathbf{B} no interior deste. Desta forma a lei de Ohm na sua forma mais geral pode ser representada por Landau e Lifshitz (1984) e Chandrasekhar (1994) como

$$\mathbf{J} = \kappa_f (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2.98)$$

em que κ_f denota a condutividade elétrica do fluido. No contexto da presente dedução κ_f será considerada constante, mas no caso mais geral esta pode variar em função da

temperatura do fluido por exemplo. O rotacional da equação (2.98) fornece

$$\frac{1}{\kappa_f} \nabla \times \mathbf{J} = \nabla \times \mathbf{E} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2.99)$$

utilizando as leis da indução de Faraday, equação (2.10), e a lei de Ampère-Maxwell, equação (2.11), a equação (2.99) se torna

$$\frac{1}{\kappa_f} \nabla \times \nabla \times \mathbf{H} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \epsilon_0 \nabla \times \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right). \quad (2.100)$$

Considere agora que podemos escrever o campo induzido \mathbf{B} em termos do campo aplicado \mathbf{H} e da permeabilidade magnética do fluido contínuo equivalente μ , sendo esta propriedade constante, de modo que $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$. Considere ainda a seguinte identidade vetorial

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{\mu} [\nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}], \quad (2.101)$$

mas pela lei de Gauss do magnetismo, \mathbf{B} é um campo vetorial de divergente nulo, de modo que $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ o que leva a

$$\nabla \times \nabla \mathbf{H} = -\frac{1}{\mu} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2.102)$$

substituindo (2.102) em (2.100) têm-se

$$-\frac{1}{\mu \kappa_f} \nabla^2 \mathbf{B} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + \epsilon_0 \nabla \times \left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right), \quad (2.103)$$

que no limite magnetostático fornece

$$-\frac{1}{\mu \kappa_f} \nabla^2 \mathbf{B} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}), \quad (2.104)$$

para trabalhar o último termo do lado direito da equação (2.104) recorre-se à seguinte identidade vetorial

$$\nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \mathbf{u} (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{B}, \quad (2.105)$$

como suspensões magnéticas são compostas por um fluido base líquido, considera-se na presente dedução a hipótese de incompressibilidade do fluido, de modo que tanto os campos \mathbf{u} e \mathbf{B} são solenoidais, de modo que

$$\nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{B}, \quad (2.106)$$

substituindo a relação (2.106) na equação (2.104) obtém-se após um rearranjo dos termos

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\mu \kappa_f} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2.107)$$

mas o termo $\nabla \mathbf{u}$ pode ser escrito em termos dos tensores \mathbf{D} e \mathbf{W} como

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \quad (2.108)$$

em que \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação e \mathbf{W} o tensor taxa de rotação

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad \text{e} \quad \mathbf{W} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T], \quad (2.109)$$

mas por \mathbf{W} se tratar de um tensor antissimétrico, recorre-se à relação entre este e seu vetor dual $\boldsymbol{\xi}$, em que $\boldsymbol{\xi}$ é a vorticidade do fluido, dada por

$$\mathbf{W} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \times \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} = \mathbf{B} \times \frac{(\nabla \times \mathbf{u})}{2}, \quad (2.110)$$

substituindo (2.110) e (2.108) em (2.107), têm-se

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{B} + \frac{(\nabla \times \mathbf{u})}{2} \times \mathbf{B} + \frac{1}{\mu\kappa_f} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2.111)$$

como no caso de um fluido magnético além da vorticidade do fluido gerar uma contribuição direta na velocidade angular de um elemento infinitesimal de fluido, as próprias partículas magnéticas também podem girar devido à rotação em seus momentos de dipolos induzidas por torques magnéticos pode-se propor uma contribuição tanto da vorticidade do fluido quanto da velocidade angular interna média de um conjunto de partículas que compõe um volume infinitesimal de fluido magnético, de modo que

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{B} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{B} + \frac{1}{\mu\kappa_f} \nabla^2 \mathbf{B}, \quad (2.112)$$

com

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\omega} + \frac{(\nabla \times \mathbf{u})}{2} \quad (2.113)$$

utilizando $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$ na equação (2.112) obtém-se

$$\frac{D\mathbf{H}}{Dt} - \mathbf{D} \cdot \mathbf{H} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{H} - \frac{1}{\mu\kappa_f} \nabla^2 \mathbf{H} = 0, \quad (2.114)$$

reescrevendo \mathbf{B} como $\mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H})$ e substituindo em (2.112) chega-se em

$$\frac{D\mathbf{H}}{Dt} - \mathbf{D} \cdot \mathbf{H} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{H} - \frac{1}{\mu\kappa_f} \nabla^2 \mathbf{H} + \frac{D\mathbf{M}}{Dt} - \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} - \frac{1}{\mu\kappa_f} \nabla^2 \mathbf{M} = 0, \quad (2.115)$$

utilizando (2.114) em (2.115) temos

$$\frac{D\mathbf{M}}{Dt} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} + \nu_m \nabla^2 \mathbf{M}, \quad (2.116)$$

em que ν_m pode ser definido como um coeficiente de difusão magnético expresso com a mesma unidade da difusividade térmica ou da viscosidade cinemática do fluido, dado por

$$\nu_m = \frac{1}{\mu k_f}. \quad (2.117)$$

Podemos adimensionalizar a equação (2.116) utilizando como escala típica para a magnetização do meio $\mu_0 H_0$, em que H_0 representa uma escala típica para o campo externo aplicado e como escala típica de comprimento e tempo l_0 e l_0/u_0 respectivamente, têm-se

$$\frac{D\mathbf{M}}{Dt} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} + \mathbf{\Omega} \times \mathbf{M} + \frac{1}{Pe_m} \nabla^2 \mathbf{M}, \quad (2.118)$$

em que Pe_m é chamado de número de Péclet magnético e representa uma relação entre uma escala tempo de difusão magnética e uma escala de tempo convectiva do escoamento, este parâmetro é dado por

$$Pe_m = \frac{u_0 l_0}{\nu_m}. \quad (2.119)$$

Note que quando o fluido possui baixa condutividade elétrica, ou seja quando $k_f \rightarrow 0$, o número de Péclet magnético também tende a zero o que faz com que o termo de difusão da equação evolutiva da magnetização domine os outros termos. De modo análogo podemos pensar que para um fluido com boa capacidade de conduzir corrente elétrica o termo de difusão é de pequena ordem. Pode-se interpretar então que conforme aumenta-se a capacidade de condução elétrica do meio as linhas de indução magnética que atravessam o material se concentram de forma mais organizada de modo que o fluxo magnético transportado através de uma seção do meio é máximo. Esse raciocínio pode ser utilizado para explicar a escolha de materiais que são bons condutores elétricos na construção de transformadores e reatores elétricos.

Para explicar a produção de magnetização pelos tensores \mathbf{D} e \mathbf{W} associados à deformação e rotação, sabemos que na presença de um campo externo aplicado a viscosidade de um fluido magnético aumenta, conforme visto em subseções anteriores deste trabalho. Um cisalhamento simples pode ser decomposto em duas componentes uma extensional e outra extensional. Considere a figura (2.5), na qual é mostrada de forma esquemática como as componentes extensional e rotacional do cisalhamento alteram a configuração dos momentos de dipolo das partículas de uma suspensão magnética. Inicialmente é mostrado de forma ilustrativa a deformação de um microagregado de partículas magnéticas no interior de um ferrofluido. Através da deformação do agregado a configuração microestrutural da suspensão é modificada, de modo que a distância e a orientação entre as partículas é alterada. Esta alteração leva a novos padrões de interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas. Esse fenômeno ocorre na microescala, mas altera a magnetização da suspensão já que por definição a magnetização de um ponto material é na verdade uma média da orientação dos momentos de dipolos das partículas inseridas neste ponto na direção de um campo externo aplicado. Em seguida é possível notar como o efeito direto da componente rotacional do cisalha-

mento muda o alinhamento final das partículas da suspensão. Cada um destes efeitos leva a uma variação da viscosidade do fluido e da magnetização deste, de acordo com a equação (2.118).

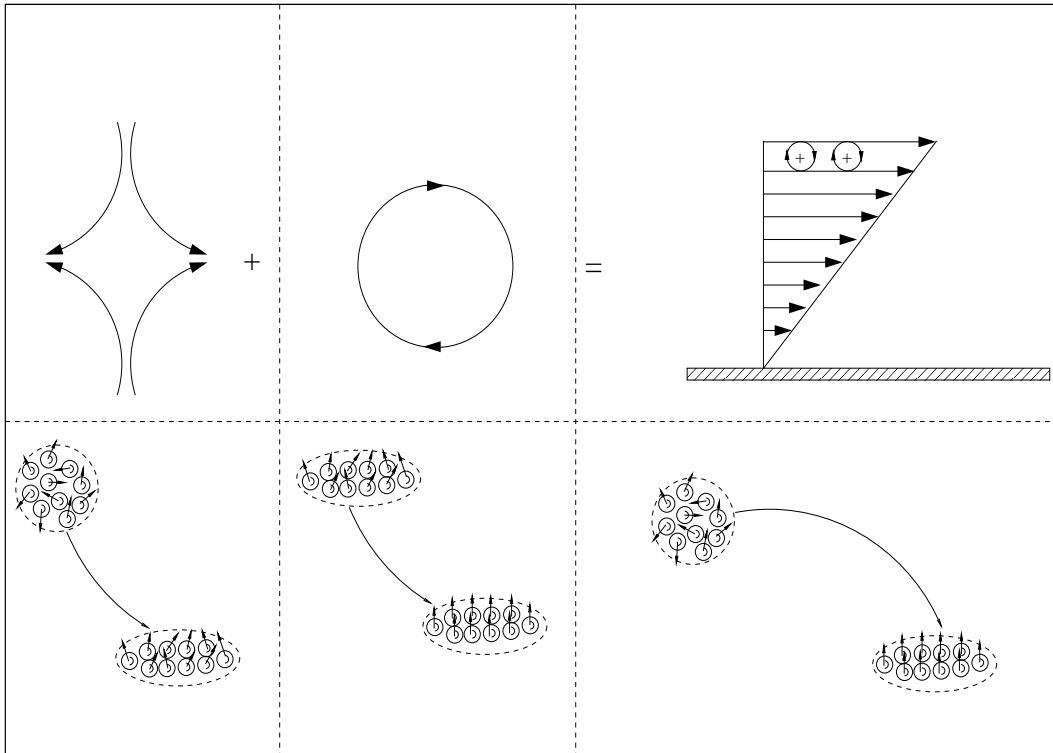


Figura 2.5: Ilustração do alinhamento dos momentos de dipolo das partículas através de um cisalhamento simples. Na figura é possível notar como o cisalhamento deforma microagregados, que através de interações magnéticas entre as partículas vizinhas após a deformação do microagregado altera os momentos de dipolo de cada partícula, em seguida a componente rotacional do cisalhamento altera ainda mais a configuração dos nanodipolos na microestrutura de uma suspensão magnética.

2.12 Sumário das equações diferenciais que regem escoamentos de fluidos magnéticos

Considerando as equações apresentadas nas seções anteriores é feito aqui um sumário do sistema de equações governantes que rege o comportamento de escoamentos de fluidos magnéticos. A formulação apresentada aqui busca mostrar o sistema de equações com o menor número possível de hipóteses restritivas e serve como um resumo do estado da arte na área e como um importante ponto de partida na formulação matemática para o desenvolvimento de softwares que visem simular escoamentos de fluidos magnéticos (CFD).

Desta forma, o sistema final de equações é dado por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.120)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mu_0 \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}, \quad (2.121)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \alpha \nabla^2 T + \frac{2\eta}{\rho C_p} (\mathbf{D} : \mathbf{D}) + \frac{1}{\rho C_p} \mathbf{B} \mathbf{H} : \mathbf{D} + \frac{1}{\rho C_p} \mathbf{B} \mathbf{H} : \mathbf{W} + \rho \dot{\epsilon}. \quad (2.122)$$

$$\rho J \left(\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} \right) = \eta' \nabla^2 \boldsymbol{\omega} + \mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H} \quad (2.123)$$

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{M} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} + \nu_m \nabla^2 \mathbf{M}, \quad \text{com } \boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.124)$$

$$\mathbf{H} = -\nabla \phi_m \quad \text{com } \nabla^2 \phi_m = -\nabla \cdot \mathbf{M}, \quad (2.125)$$

com a condição inicial do campo de magnetização do escoamento dada por

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_0(H, n, T) \rightarrow \text{modelo de magnetização de equilíbrio}, \quad (2.126)$$

em que n denota o número de densidade da suspensão, ou seja, o número de partículas pelo volume total da suspensão, T a temperatura do fluido e H é o campo magnético aplicado.

2.12.1 Adimensionalização do sistema de equações governantes da FHD

A fim de que possa ser proposto um sistema consistente para a resolução das equações diferenciais parciais que governem escoamentos de fluidos magnéticos no contexto da Ferrohidrodinâmica através de técnicas computacionais (CFD) considerando no caso mais geral escoamentos de fluidos magnéticos sujeitos à gradientes de temperatura e campo magnético e incluindo efeitos de assimetria no tensor de tensões, uma adimensionalização do sistema de equações governantes, (2.120-2.126), é conveniente. Para tanto as seguintes escalas serão consideradas

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &= \frac{\mathbf{u}}{u_0}; & p^* &= \frac{p}{\rho u_0^2}; & t^* &= \frac{u_0 t}{L}; & \mathbf{M}^* &= \frac{\mathbf{M}}{H_0}; & \mathbf{H}^* &= \frac{\mathbf{H}}{H_0}; \\ \mathbf{D}^* &= \frac{\mathbf{D} L}{u_0}; & \boldsymbol{\omega}^* &= \frac{\boldsymbol{\omega} L}{u_0}; & \mathbf{B}^* &= \frac{\mathbf{B}}{\mu_0 H_0}, \end{aligned} \quad (2.127)$$

em que u_0 denota uma escala de velocidade típica do problema, L denota uma escala típica de comprimento e H_0 representa um valor típico do campo magnético imposto no fluido em escoamento. Utilizando as escalas sugeridas em (2.127), o sistema completo de equações governantes que rege o movimento de fluidos magnéticos, não isotérmicos, assimétricos, é dado por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.128)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Re_m} \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}, \quad (2.129)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{Pe_\alpha} \nabla^2 T + Ec_\eta \mathbf{D} : \mathbf{D} + Ec_m \mathbf{B} \mathbf{H} : \mathbf{D} + Ec_m \mathbf{B} \mathbf{H} : \mathbf{W}, \quad (2.130)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{Re_s} \nabla^2 \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{Re_{ms}} \mathbf{M} \times \mathbf{H} \quad (2.131)$$

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{M} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} + \frac{1}{Pe_m} \nabla^2 \mathbf{M}, \quad \text{com } \boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.132)$$

$$\mathbf{H} = -\nabla \phi_m \quad \text{com } \nabla^2 \phi_m = -\nabla \cdot \mathbf{M} \quad (2.133)$$

com a condição inicial do campo de magnetização dada por

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_0(\alpha, \phi, Pe) \rightarrow \text{modelo de magnetização de equilíbrio}, \quad (2.134)$$

em que ϕ representa a fração volumétrica de partículas da suspensão magnética em escoamento. É interessante notar que o sistema completo de equações adimensionais possui parâmetros físicos relacionados à escalas de tempo típicas do fluido (escalas macroscópicas) e das partículas (escalas microscópicas).

A tabela (2.1) lista todos os parâmetros físicos necessários para a completa modelagem do escoamento de fluidos magnéticos assimétricos. É importante chamar a atenção para o acoplamento entre o comportamento do escoamento do fluido magnético, visto como um fluido contínuo equivalente, e a dinâmica microestrutural que resulta na alteração de diferentes parâmetros físicos associados à propriedades do sistema particulado, mas que influencia o movimento do fluido numa escala macroscópica.

É importante notar que não existe um modelo teórico para a quantificação do parâmetro η' assim como não existem modelos para a predição do comportamento da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas não-coloidais. Além de mostrar uma metodologia experimental consistente para a medição da viscosidade de spin, o presente trabalho visa propor nas seções subsequentes um modelo completo para a determinação da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas coloidais e não coloidais, considerando interações hidrodinâmicas e magnéticas entre sistemas particulados com muitos corpos através de simulações computacionais da dinâmica microestrutural de suspensões magnéticas.

Parâmetros físicos macroscópicos (fluido)	Expressão
Número de Reynolds $\rightarrow Re$	$\frac{\rho u_0 L}{\eta}$
Número de Reynolds magnético $\rightarrow Re_m$	$\frac{\rho u_0^2}{\mu_0 H_0^2}$
Número de Péclet (eq. energia) $\rightarrow Pe_\alpha$	$\frac{u_0 L}{\alpha}$
Número de Eckert viscoso $\rightarrow Ec_\eta$	$\frac{2\eta u_0}{\rho C_p \Delta T L}$
Número de Eckert magnético $\rightarrow Ec_m$	$\frac{\mu_0 H_0^2}{\rho C_p \Delta T}$
Número de Reynolds de Spin $\rightarrow Re_s$	$\frac{\rho J u_0 L}{\eta'}$
Número de Reynolds magnético de Spin $\rightarrow Re_{m_s}$	$\frac{\rho J u_0^2}{\mu_0 H_0^2 L^2}$
Número de Péclet magnético $\rightarrow Pe_m$	$\frac{u_0 l_0}{\nu_m}$
Parâmetros físicos microscópicos (partículas)	Expressão
Parâmetro α	$\frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T}$
Fração volumétrica de partículas $\rightarrow \phi$	$\frac{N v_p}{V_T}$
Número de Péclet Browniano $\rightarrow Pe$	$\frac{u_0 L}{D_B}$

Tabela 2.1: Parâmetros físicos necessários para a formulação completa de escoamentos de fluidos magnéticos assimétricos

Vale notar ainda que podemos obter diferentes regimes de escoamentos de fluidos magnéticos de acordo com os parâmetros adimensionais que surgem no modelo proposto. Por exemplo, na condição em que $Re \rightarrow 0$ o termo de difusão viscosa de quantidade de movimento na equação (2.129) domina os outros termos, como o parâmetro de Reynolds relaciona a inércia do escoamento com forças viscosas, as forças de inércia neste regime são de pequena ordem. Entretanto o parâmetro definido nesse contexto como o número de Reynolds magnético Re_m relaciona forças de inércia com forças magnéticas, nas condições em que $Re \rightarrow 0$ e $Re_m \sim 1$, as forças magnéticas escalam com as forças de inércia, que por sua vez são de pequena ordem, nesse limite teríamos um regime de Stokes não magnético. Entretanto, se $Re \rightarrow 0$ e $Re_m \ll 1$ os termos magnéticos dominam os termos fracos de inércia e teríamos um regime de Stokes magnético. Existem na verdade diversas combinações dos parâmetros Re e Re_m que determinam diferentes regimes de escoamento. Na tabela abaixo esses regimes são listados em termos da ordem de magnitude destes parâmetros físicos.

Parâmetros	Equação do movimento	Regime
$Re \ll 1$ e $Re_m \sim 1$	$\mathbf{0} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v}$	Stokes não magnético
$Re \ll 1$ e $Re_m \ll 1$	$\mathbf{0} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{Re_m} \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}$	Stokes magnético
$Re \gg 1$ e $Re_m \sim 1$	$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \frac{1}{Re_m} \mathbf{M} \cdot \nabla \mathbf{H}$	Euler magnético
$Re \gg 1$ e $Re_m \gg 1$	$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p$	Euler não magnético

Tabela 2.2: Regimes de escoamentos de fluidos magnéticos em função dos parâmetros físicos do problema

2.12.2 Uma proposta de um modelo completo de FHD para ser utilizado em CFD

O sistema de equações governantes expresso em (2.128-2.134), com os parâmetros adimensionais descritos na tabela (2.1) pode ser resolvido através de técnicas numéricas de discretização espaciais e temporais com o intuito de analisar o comportamento dos principais campos escalares e vetoriais necessários à completa descrição de um escoamento de um fluido magnético assimétrico na presença de um campo aplicado. Esta seção discute uma proposta para um algoritmo a ser utilizado na linha de dinâmica dos fluidos computacionais (CFD) com este propósito.

Etapas específicas como pré ou pós processamento de dados não são do interesse da presente discussão, o objetivo é discutir uma metodologia de processamento de dados baseada em uma ordem específica de solução do sistema completo de equações da FHD para o caso mais geral possível.

O primeiro passo seria a definição dos parâmetros físicos que regem o escoamento para em seguida o usuário impor as condições de contorno do problema, bem como uma condição inicial para os principais campos envolvidos no processo. Para o caso mais geral, no qual existem gradientes de temperatura recomenda-se a resolução do campo de temperaturas a partir do caso mais simples possível de fluido estático e não magnético, sem geração interna de energia e sem dissipação de energia por tensões viscosas ou magnéticas, apenas para esta solução seja utilizada como um campo inicial de temperatura. Além disso o valor inicial do campo de magnetização é dado por um modelo de magnetização de equilíbrio. Neste caso não existiriam gradientes de magnetização no domínio do escoamento.

O segundo passo seria a solução simultânea das equações (2.128) e (2.129) utilizando

um algoritmo de acoplamento pressão-velocidade para escoamentos incompressíveis (foco desta discussão). Note que neste passo inicial o escoamento estaria ausente de forças magnéticas (primeira iteração), já que pela condição inicial do campo de magnetização, ainda não existiriam gradientes de magnetização nesta etapa.

Posteriormente a equação da energia (2.130) deveria ser resolvida considerando já efeitos convectivos, pois nesta etapa já existe um primeiro campo de velocidades não nulo calculado no segundo passo, bem como efeitos de dissipação viscosa de energia, porém sem produção interna de energia por tensões magnéticas, já que os campos \mathbf{H} e \mathbf{B} ainda não foram determinados neste ponto.

Em seguida seria resolvida a equação do momento angular (2.131) e da magnetização (2.132). Neste ponto já existe um campo com gradiente não nulo de magnetização, de modo que os principais campos magnéticos podem agora ser determinados. O próximo passo seria a solução da equação do potencial magnético ϕ_m , baseada no campo de magnetização determinado no passo anterior e em seguida a solução da equação de Poisson para a quantificação do campo externo aplicado \mathbf{H} , este passo consiste na solução da equação (2.133).

Neste momento todos os campos necessários para a descrição do escoamento já foram determinados, ou seja, já se conhece o valor de $\mathbf{u}, p, T, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{M}, \mathbf{H}$ no instante de tempo numérico logo após o inicial. A partir deste ponto o sistema de equações (2.128-2.134) deve ser resolvido diversas vezes através de um algoritmo sequencial de discretização temporal para que a solução do escoamento real evolua no tempo. Abaixo segue um algoritmo para ser utilizado em CFD com o intuito de simular escoamentos de fluidos magnéticos não isotérmicos, assimétricos, na presença de gradientes de campo magnético e temperatura.

Algoritmo

(1)Input de dados

- Parâmetros físicos: $\alpha, Pe, \phi, Re, Eu_m, Pe_\alpha, Ec_\eta, Ec_m, Re_s, Eu_{m_s}$
- Condições de contorno para: $\mathbf{u}, p, T, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{M}, \mathbf{H}$
- Condições iniciais para: $\mathbf{u}, p, T, \mathbf{H}$ (campos constantes)
- Condições para $\boldsymbol{\omega} \rightarrow \boldsymbol{\omega} = \mathbf{0}$
- Cálculo da condição inicial: $\mathbf{M} = \mathbf{M}_0(\alpha, \phi, Pe)$ (equilíbrio)

(2)Para $t = 0 \rightarrow$ início da solução

- Solução simultânea das eq.(2.128) e (2.129) (acoplamento P- \mathbf{u}) sem magnetismo
- Solução da equação (2.130) sem o termo magnético
- Solução das eq. (2.131), (2.132) e (2.133)

(3)Para $t = \{\Delta t, 2\Delta t, \dots, n_{past}\Delta t\}$

- Solução das eq.(2.128),(2.129),(2.130),(2.131),(2.132) e (2.133) completas

(3)fim

PARTE II

Micromecânica e microhidrodinâmica de suspensões magnéticas

Os seguintes tópicos serão abordados nesta parte do trabalho:

- Estudos preliminares acerca da dinâmica de uma partícula coloidal;
- Formulação, resultados e discussões sobre o problema de duas partículas bi-dispersas interagindo hidrodinamicamente e magneticamente para compreensão mais detalhada da dinâmica de suspensões magnéticas diluídas, principalmente no que tange ao efeito de rotação das partículas na estabilidade da suspensão;
- Formulação, validação, resultados e discussões do problema de muitos corpos para investigação do comportamento de suspensões magnéticas sem interações hidrodinâmicas;
- Um estudo criterioso e extenso sobre os efeitos de interações hidrodinâmicas na física de suspensões magnéticas coloidais e não coloidais;

Capítulo 3 ESTUDOS PRELIMINARES ENVOLVENDO A DINÂMICA DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA

3.1 Suspensões coloidais magnéticas

Suspensões coloidais consistem em misturas bifásicas líquido-sólido, de partículas de tamanho nanométrico imersas em um fluido base. De um modo geral define-se que uma suspensão é coloidal para partículas com raio a de aproximadamente $1\mu m$. As forças significativas que atuam em partículas integrantes de suspensões coloidais incluem: forças de repulsão eletrostática, forças atrativas de van der Waals, forças viscosas e forças Brownianas. Para o caso de uma suspensão coloidal magnética ainda atuam forças magnéticas devido à interação entre os momentos de dipolo magnéticos das partículas que compõe a suspensão e devido à interação entre um campo magnético externo aplicado a suspensão com os momentos de dipolo destas. Forças atrativas de van der Waals e forças de repulsão eletrostáticas são forças tipicamente de curto alcance. Do ponto de vista da modelagem numérica de suspensões coloidais magnéticas a formação de agregados induzida por interações de curto alcance exige a consideração de passos de tempo extremamente pequenos para que se possa enxergar os efeitos de forças atrativas de van der Waals e forças de repulsão eletrostáticas na dinâmica das partículas.

O foco do presente trabalho com relação ao estudo da dinâmica de suspensões magnéticas considera as seguintes forças atuantes na análise numérica do problema: força de empuxo líquido (problema de sedimentação), força de arrasto hidrodinâmica (e interações hidrodinâmicas para problemas de muitos corpos), forças de repulsão (lubrificação) entre partículas e entre partículas-parede, forças de contato (Hertz) entre partículas e entre partículas-parede (para problemas com maior inércia de partícula), forças brownianas e forças de interação magnética entre dipolos de partícula e entre dipolos e um campo externo aplicado.

Dentre as forças citadas apenas duas são típicas de suspensões coloidais magnéticas: forças Brownianas e forças magnéticas. As forças magnéticas atuantes entre as partículas da suspensão serão discutidas em detalhes no próximo capítulo. Já as forças Brownianas são discutidas já no presente capítulo.

3.2 Forças Brownianas

Partículas de tamanho nanométrico estão sujeitas a um fenômeno conhecido por movimento Browniano. Observado primeiramente pelo botânico Robert Brown em 1827, este fenômeno físico está associado à influência de diversos choques de moléculas de um líquido sobre partículas nanométricas imersas neste. Por mais que estas partículas sejam muitas vezes maiores que as moléculas do fluido, a enorme quantidade de colisões moleculares faz com que uma partícula de tamanho nanométrico esteja sujeita a um movimento randômico conhecido como movimento browniano. De certa forma a descoberta deste fenômeno físico fortaleceu a crença dos atomistas da época na existência do átomo, pois no início do século XIX o conceito do átomo era apenas uma hipótese ainda não confirmada. Um dos primeiros físicos a propor uma teoria capaz de quantificar informações importantes para a compreensão do fenômeno foi Albert Einstein (1905).

As trajetórias associadas ao movimento browniano são randômicas, em outras palavras, se um trecho de uma trajetória browniana é ampliado, o mesmo será similar à trajetória completa. A figura (3.1) ilustra uma trajetória típica browniana.

$$Pe \ll 1$$

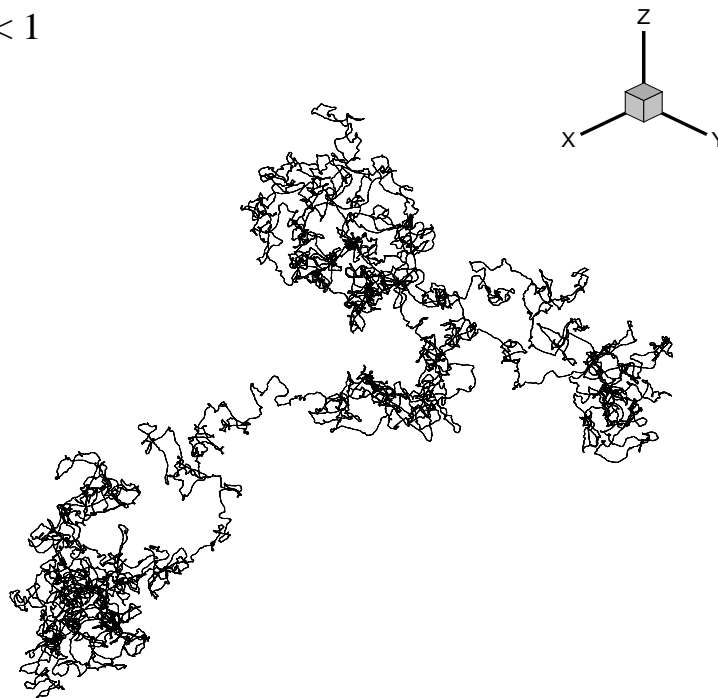


Figura 3.1: Trajetória browniana típica obtida através de simulação computacional feita por Gontijo (2010)

Desta forma é impossível utilizar uma curva matemática monotônica capaz de descrever a trajetória de uma partícula sujeita ao movimento browniano. Assim, uma forma mais eficaz de se estudar o fenômeno consiste na análise da variância do deslocamento da partícula. Em seu artigo pioneiro de 1905 Einstein determinou uma relação analítica para o deslocamento médio quadrático de uma partícula sujeita ao movimento browniano, dada por

$$\langle x^2 \rangle = 2\mathcal{D}t, \quad (3.1)$$

em que $\langle \ \rangle$ denota a média em cima de diversos experimentos ou realizações, x^2 representa o deslocamento de uma partícula em determinada direção elevado ao quadrado, \mathcal{D} representa um coeficiente de difusão browniano e t denota o tempo do experimento. É interessante notar que o deslocamento médio quadrático de uma partícula sujeita a movimento browniano é linear com o tempo de observação, resultado contra-intuitivo quando se pensa em termos de um deslocamento comum de um corpo segundo equações do movimento tipo Torricelli que preve deslocamentos médios quadráticos escalando com o tempo do processo ao quadrado.

Como o movimento browniano é caracterizado por flutuações na velocidade da partícula, existe então conforme mencionado anteriormente um coeficiente de difusão browniano associado à estas flutuações. De um modo geral coeficientes de difusão anisotrópicos são expressos em termos tensoriais, de modo que a difusividade associada ao movimento browniano pode ser expressa em termos de um tensor de segunda ordem \mathcal{D} , porém, devido à isotropia das flutuações associadas ao movimento browniano, têm-se que $\mathcal{D} = \mathcal{D}\mathbf{I}$. A magnitude do coeficiente \mathcal{D} depende da intensidade da agitação molecular do fluido (associada à temperatura do mesmo) e do grau de mobilidade da partícula imersa no líquido. Baseado nesta idéia, chamada aqui de teorema de equilíbrio flutuação-dissipação, o coeficiente \mathcal{D} é dado por

$$\mathcal{D} = k_B T \mathcal{M}, \quad (3.2)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann ($k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ N.m.K}^{-1}$) e \mathcal{M} é uma matriz associada à mobilidade da partícula sólida, dada por

$$\mathcal{M} = \frac{\mathbf{I}}{6\pi\eta a}, \quad (3.3)$$

em que η é a viscosidade dinâmica do fluido e a é o raio da partícula sólida. O coeficiente de difusão Browniana expresso em (3.3) é chamado de coeficiente de difusão Stokes-Einstein.

Do ponto de vista numérico é importante saber modelar forças de origem brownianas a fim de se analisar o comportamento de suspensões coloidais. O ponto de partida para a obtenção da força browniana que atua sobre uma partícula nanométrica consiste na equação diferencial estocástica de Langevin, dada por

$$\frac{d\mathbf{x}^2}{dt^2} + \zeta \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{f}_r(t)}{m}, \quad (3.4)$$

a equação (3.4) consiste na aplicação do postulado da segunda lei de Newton na descrição do movimento de uma partícula de massa m , ζ representa o inverso do tempo de relaxação da partícula ($1/6\pi\eta a$), \mathbf{x} denota a posição da partícula e $\mathbf{f}_r(t)$ é a força randômica variando no tempo associada ao movimento browniano. A solução da equação (3.4) é obtida pelo método do fator integrante, que fornece

$$\mathbf{u}(t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{e^{-\zeta t}}{m} \int_0^t e^{\zeta\alpha} \mathbf{f}_r(\alpha) d\alpha, \quad (3.5)$$

a solução fornecida na equação (3.5) considera a existência de duas escalas de tempo distintas, uma associada ao movimento da partícula t e outra associada à velocidade das flutuações correspondentes ao movimento molecular (mais rápidas, associadas a um tempo α). A determinação da força $\mathbf{f}_r(t)$ é feita utilizando-se duas hipóteses consistentes com observações associadas ao movimento Browniano. A primeira delas consiste na admissão de uma isotropia destas forças e a segunda por uma falta de correlação entre forças randômicas em um instante de tempo t e um instante de tempo posterior t' . Em outras palavras diz-se que o movimento browniano é caracterizado pela falta de memória e isotropia nas flutuações de velocidade. Estas duas hipóteses podem ser expressas matematicamente por

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{f}_r(t) \rangle &= \mathbf{0} \\ \langle \mathbf{f}_r(t) \mathbf{f}_r(t') \rangle &= \mathbf{F} \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (3.6)$$

em que \mathbf{F} representa um valor típico da intensidade da força randômica browniana $\mathbf{f}_r(t)$ desta forma pode-se tomar uma média em cima das realizações $\langle \quad \rangle$ e determinar a autocorrelação no tempo da velocidade de uma partícula sujeita a movimento browniano, a partir da equação (3.5) e das hipóteses expressas em (3.6) têm-se

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}(t) \rangle &= \frac{e^{-\zeta t}}{m} \int_0^t e^{\zeta\alpha} \langle \mathbf{f}_r(\alpha) \rangle d\alpha \\ \langle \mathbf{u}(t) \mathbf{u}(t') \rangle &= \frac{e^{-2\zeta t}}{m^2} \int_0^t \int_0^{t'} e^{\zeta\alpha} e^{\zeta\alpha'} \langle \mathbf{f}_r(\alpha) \mathbf{f}_r(\alpha') \rangle d\alpha d\alpha', \end{aligned} \quad (3.7)$$

utilizando a condição de falta de memória, expressa em (3.6) têm-se

$$\mathbf{R}(t - t') = \langle \mathbf{u}(t) \mathbf{u}(t') \rangle = e^{-\zeta(t-t')} \frac{\mathbf{F}}{12m\pi\eta a}, \quad (3.8)$$

em que $(t - t')$ representa um intervalo de tempo no qual a força browniana $\mathbf{f}_r(t)$ sofre muitas flutuações, mas a velocidade da partícula $\mathbf{u}(t)$ é pouco alterada. A partir do princípio da equipartição de energia sabe-se que a energia cinética da partícula é dividida igualmente entre seus três modos de translação (Russel et al. (1989)), em termos matemáticos este princípio é expresso por

$$\frac{m}{2} \langle \mathbf{u}(t) \mathbf{u}(t') \rangle = \frac{k_B T}{2} \boldsymbol{\delta}, \quad (3.9)$$

comparando as equações (3.8) e (3.9) no limite em que $(t - t') \rightarrow 0$, obtém-se

$$\mathbf{F} = 12\pi\eta a k_B T \boldsymbol{\delta}, \quad (3.10)$$

de onde pode-se concluir que a força browniana escala com o raio da partícula, enquanto a força peso escala com o raio elevado ao cubo. Isto explica porque agregados com mais partículas são dominados pelo processo de sedimentação diferencial, enquanto agregados menores estão mais sujeitos ao movimento browniano. Considere agora o traço da segunda equação expressa em (3.6):

$$\langle \mathbf{f}r(t) \cdot \mathbf{f}r(t') \rangle = 36\pi\eta a k_B T \delta(t - t') = (6\pi\eta a)(6k_B T)\delta(t - t'), \quad (3.11)$$

da equação (3.11) pode-se inferir uma expressão para a força browniana $\mathbf{f}_r(t)$, dada por

$$\mathbf{f}r(t) = \left(\frac{(6\pi\eta a)(6k_B T)}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}. \quad (3.12)$$

Do ponto de vista numérico a equação (3.12) pode ser utilizada para a modelagem de forças brownianas que atuam sobre uma partícula nanométrica em uma suspensão coloidal. Nesta expressão $\delta\tau$ representa um passo de tempo típico Browniano, que em termos adimensionais para utilização em códigos computacionais pode ser expresso como uma fração do número de Péclet e $\boldsymbol{\xi}$ um vetor randômico unitário que pode ser gerado numericamente através de uma rotina eficaz de geração de números randômicos.

É importante falar que a intensidade da força Browniana expressa em (3.12) é determinada para uma partícula isolada baseada no teorema da flutuação-dissipação utilizando a matriz mobilidade para uma única partícula livre da ação de outras. Para um sistema composto por muitas partículas interagindo hidrodinamicamente e magneticamente outras flutuações além daquelas impostas pelo movimento Browniano influenciarão o movimento da partícula e a expressão em (3.12) não seria rigorosamente válida. Entretanto a escala típica para a ordem de magnitude desta força Browniana expressa em (3.12) é comumente utilizada como uma aproximação para a simulação de suspensões coloidais magnéticas (Odenbach, 2009), pois as propriedades importantes associadas a esta força, expressas em (3.7) são satisfeitas utilizando a presente abordagem.

3.3 Formulação para a modelagem do movimento de uma partícula isolada

A presente análise possui como objetivo determinar o movimento de uma pequena partícula esférica, sujeita às forças gravitacionais, viscosas e ao movimento browniano imposto pelas moléculas do líquido base. A equação dimensional que rege o movimento da partícula é dada pela segunda lei de Newton, expressa por:

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -6\pi\eta a \mathbf{u} + \Delta\rho \mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (3.13)$$

em que m denota a massa da partícula, \mathbf{u} é o vetor velocidade da partícula, t a variável tempo, η é a viscosidade dinâmica do fluido, a representa o raio da partícula esférica, $\Delta\rho$

é a diferença entre a massa específica do fluido e da partícula, \mathbf{g} é o vetor aceleração da gravidade, \mathcal{D} é o coeficiente de difusão browniana de Stokes-Einstein, $\boldsymbol{\xi}$ representa um vetor randômico unitário com distribuição Gaussiana entre $[-1, 1]$ que muda a cada passo de tempo no qual a equação diferencial estocástica de Langevin (3.13), está sendo resolvida e $\delta\tau$ é uma escala de tempo típica Browniana, que em termos adimensionais será dada em função do número de Péclet, como será visto em seções posteriores. A equação (3.13) quando resolvida fornece a velocidade da partícula em uma suspensão coloidal ao longo de toda a história do processo de sedimentação. Lembrando que maiores detalhes sobre a modelagem das forças brownianas foram dados em seções anteriores e que a intensidade desta é baseada no teorema a flutuação-dissipação para uma partícula isolada. Após a solução da velocidade da partícula, realizada numericamente através do método de Runge-Kutta de quarta ordem, a posição da partícula é calculada utilizando o método de Euler aplicado a equação (3.14)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}. \quad (3.14)$$

Para a análise proposta foram consideradas duas adimensionalizações da equação (3.13). Na primeira adimensionalização as seguintes escalas de velocidade e tempo foram utilizadas:

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_s} \quad \text{e} \quad t^* = \frac{t\mathcal{D}}{a^2}, \quad (3.15)$$

em que U_s é a velocidade de Stokes da esfera, desta forma a equação governante do movimento da partícula adimensional é dada por:

$$\frac{St}{Pe} \frac{d\mathbf{u}^*}{dt^*} = -\mathbf{u}^* + \mathbf{g}^* + \frac{1}{Pe} \left(\frac{6}{\delta\tau^*} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (3.16)$$

em que St é o número de Stokes, que representa uma relação entre escalas do tempo de relaxação da partícula e do tempo convectivo do escoamento, e Pe o número de Péclet, associado a uma relação entre uma escala de tempo de difusão browniana e uma escala de tempo convectiva do escoamento. Estes parâmetros são definidos por:

$$St = \frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \quad \text{e} \quad Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}}. \quad (3.17)$$

A segunda adimensionalização utilizada no presente trabalho, baseia-se nas seguintes escalas de velocidade e tempo:

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_s} \quad \text{e} \quad t^* = \frac{t6\pi\mu a}{m}, \quad (3.18)$$

a equação governante adimensional se torna então:

$$\frac{d\mathbf{u}^*}{dt^*} = -\mathbf{u}^* + \mathbf{g}^* + \left(\frac{6}{\widetilde{Pe}\delta\tau^*} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (3.19)$$

em que $\widetilde{Pe} = Pe.St$.

3.3.1 Trajetórias relativas típicas

A primeira análise deste problema tem como objetivo determinar as trajetórias típicas para uma partícula sem inércia, sujeita a ação da gravidade e à movimento browniano para diferentes números de Péclet. Desta forma, a equação governante adimensional é dada por:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{g}^* + \frac{1}{Pe} \left(\frac{6}{\delta\tau^*} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (3.20)$$

a figura (3.2) indica as trajetórias relativas típicas para o movimento da esfera considerando diferentes números de Péclet. É possível observar que para baixos valores de Péclet, a intensi-

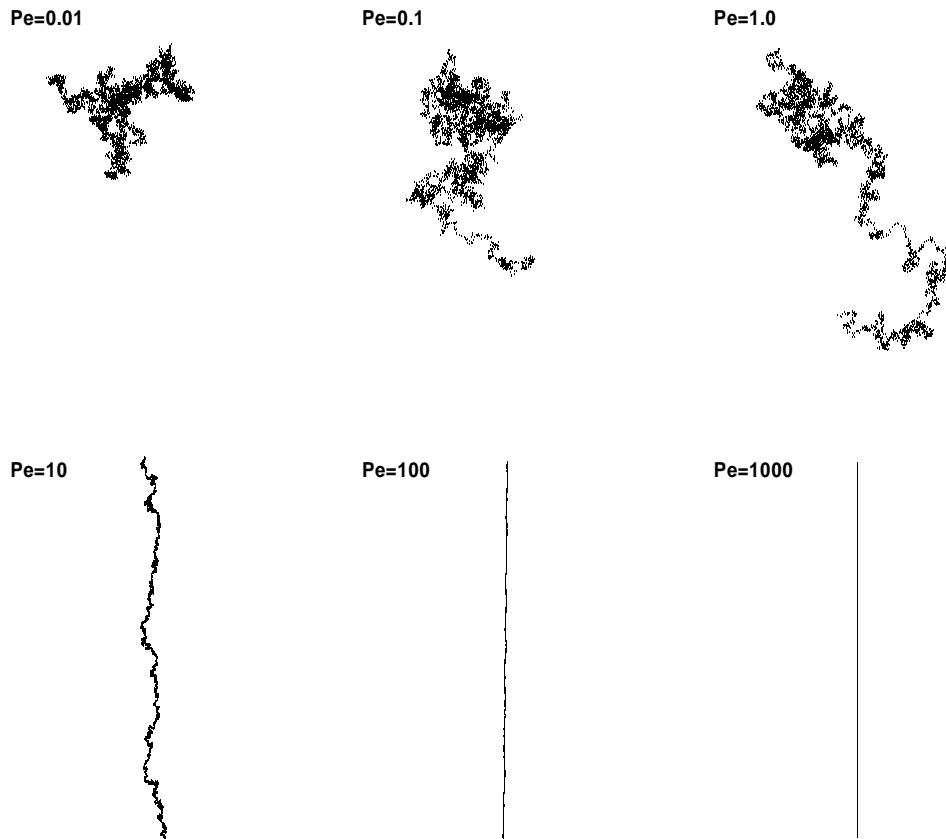


Figura 3.2: Trajetórias da partícula para diferentes números de Péclet

dade dos *kicks* randômicos de moléculas do fluido base sobre a partícula é muito grande e que mesmo sujeita à ação líquida da gravidade, a partícula não consegue sedimentar e fica sujeita ao movimento randômico típico associado a um processo de difusão Browniano. Conforme o número de Péclet aumenta o movimento determinístico imposto pelo campo gravitacional pouco a pouco passa a dominar a dinâmica da partícula e a mesma passa a sedimentar, ainda com alguns movimentos randômicos, mas estabelecendo uma tendência clara de sedimentar. Para valores altos de Péclet o movimento browniano passa a ser desprezível e o que se observa é um movimento retilíneo de queda livre.

A fim de validar a eficiência do gerador de números randômicos desenvolvido na construção do algoritmo responsável pela solução da equação estocástica de Langevin, a função distribuição de probabilidades do deslocamento médio da partícula foi plotada e seu gráfico é mostrado na figura (3.3). Todos os gráficos mostrados neste capítulo foram obtidos considerando médias amostrais em cima de 50 realizações. Exceto os gráficos que ilustram a trajetória de uma partícula teste e o gráfico (3.4). A figura (3.3) mostra que o deslocamento

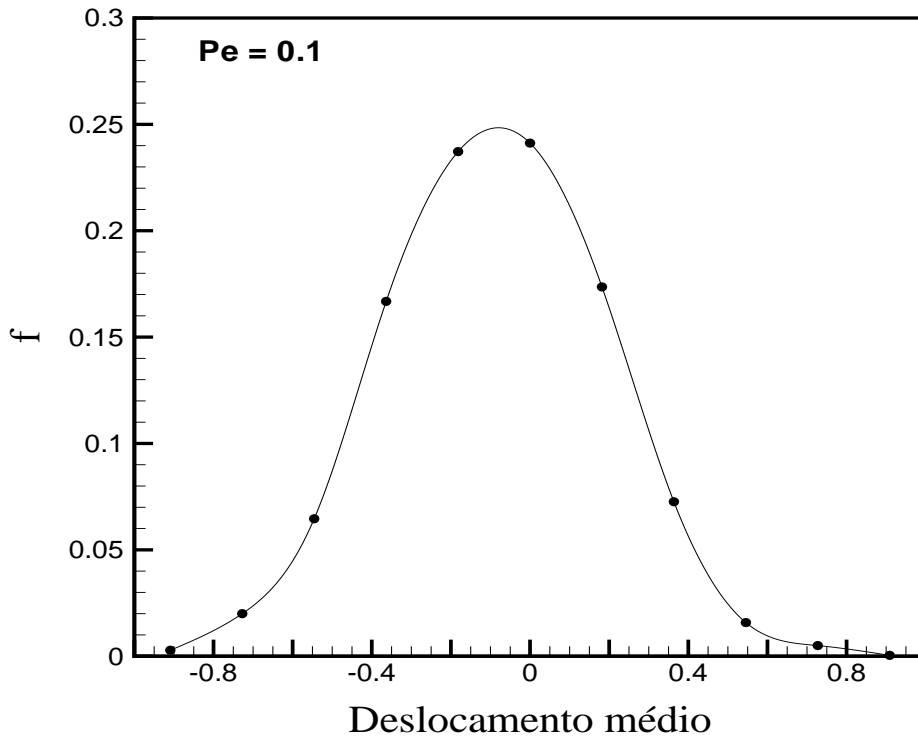


Figura 3.3: Função distribuição de probabilidade do deslocamento médio da partícula em uma determinada direção. Os pontos representam os valores numéricos obtidos em cima de várias realizações enquanto a linha cheia representa um ajuste gaussiano.

médio da partícula, onde a média foi feita em cima de diversas realizações do movimento, segue uma distribuição Gaussiana. O Deslocamento médio da partícula é nulo, ou seja, existe igual probabilidade da partícula realizar deslocamentos positivos e negativos em relação a um ponto de partida aleatório e a maioria dos deslocamentos ocorrem em torno desta média. Esta distribuição é coerente com o que se espera de uma partícula sujeita ao movimento browniano, que é de natureza probabilística e isotrópica. A distribuição Gaussiana mostrada em (3.3) mostra que a subrotina utilizada para a geração de números randômicos gera um comportamento estatístico consistente de uma partícula isolada sujeita a ação do movimento Browniano. É importante falar que foi desenvolvida uma subrotina própria em Fortran para a geração dos números randômicos utilizados em todas as simulações computacionais apresentadas nesta Tese.

3.3.2 Efeito da inércia da partícula em sua trajetória

A fim de se verificar a influência da inércia da partícula na trajetória apresentada pela mesma, foram realizadas duas simulações para o movimento de uma partícula sujeita a movimento browniano com $Pe = 0.1$. Em um caso foi considerado $St = 0$, condição de ausência total de inércia de partícula, de modo que a partícula responde instantaneamente a qualquer perturbação imposta por kicks randômicos das moléculas do fluido base e em outro caso foi considerado um pequeno efeito de inércia de partícula, com $St = 0.1$. A figura (3.4.b) ilustra a grande diferença no comportamento destas trajetórias. A consideração de um pequeno efeito de inércia faz com que a partícula passe a perceber uma tendência de alteração de movimento apenas um certo tempo depois da aplicação da força randômica browniana, de modo que sua trajetória seja completamente diferente de um random-walk típico, como mostrado na figura (3.4.a).

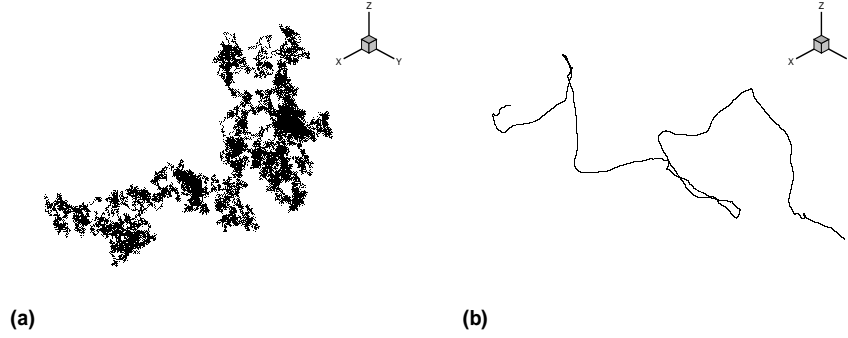


Figura 3.4: Trajetória de uma partícula em movimento browniano com $Pe=0.1$ para (a) $St=0$ e (b) $St=0.1$

3.3.3 Deslocamentos médios quadráticos

Einstein determinou que a média sobre as realizações do deslocamento quadrático de uma partícula em movimento browniano deve ser proporcional ao tempo de observação e determinou a constante de proporcionalidade, de modo que:

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt, \quad (3.21)$$

em termos adimensionais, considerando a primeira adimensionalização mencionada, a equação a cima se torna simplesmente:

$$\langle x^{*2} \rangle = 2t^*, \quad (3.22)$$

a figura (3.5) ilustra a variação de $\langle x^{*2} \rangle$ com t^* para diferentes números de Péclet.

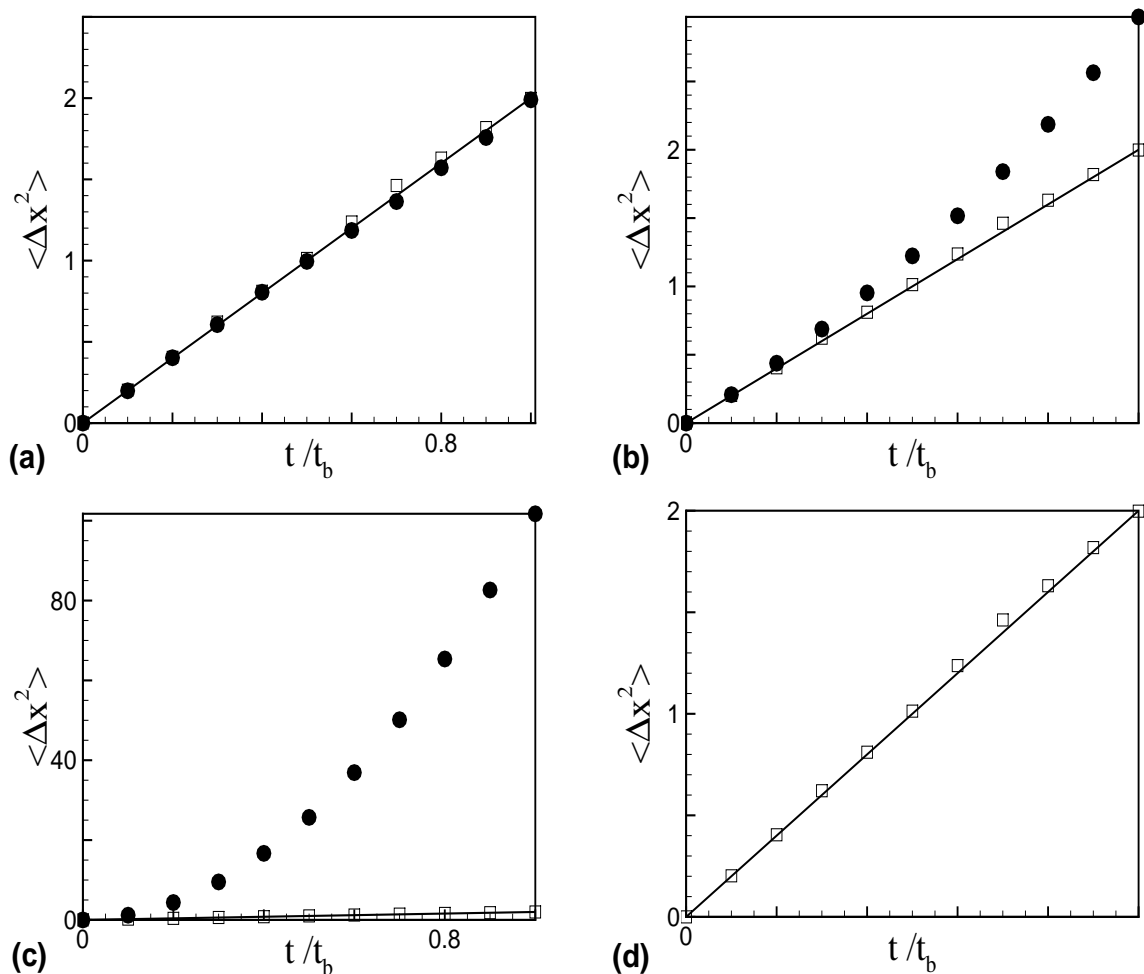


Figura 3.5: Deslocamento médio quadrático para (a) $Pe=0.1$, (b) $Pe=1$, (c) $Pe=10$ e (d) ampliação do comportamento observado para $Pe=10$. A linha cheia denota a teoria de Einstein expressa pela equação (3.22), quadrados vazios denotam os valores numéricos obtidos em cima de várias realizações para deslocamentos em uma das direções perpendiculares à gravidade e o círculo preenchido denota os mesmos valores numéricos obtidos para a direção paralela à gravidade.

É possível observar que em regimes de baixos Péclets, o comportamento do deslocamento quadrático médio da partícula varia linearmente com o tempo, conforme prevê a teoria de Einstein do movimento browniano. Conforme aumenta-se o número de Péclet este comportamento passa a tender a uma parábola, conforme esperado para corpos em queda livre pela equação de Torricelli. É importante notar também que a constante de proporcionalidade para o comportamento em baixos números de Péclet coincide com a que era prevista pela teoria de Einstein.

3.3.4 Efeito da inércia da partícula em sua velocidade média

A fim de verificar a influência da inércia no movimento da partícula foram plotados os comportamentos da relaxação da partícula para diferentes números de Péclet. A adimensionalização utilizada para esta análise foi a segunda, dada pela equação (3.19). Os gráficos da figura (3.6) ilustram este comportamento. É interessante notar que para o valor de $Pe = 0.01$ a partícula com inércia consegue sedimentar, mesmo que de forma não determinística. Este resultado é diferente do gráfico das trajetórias típicas para uma partícula sem inércia. É interessante notar também que nas direções perpendiculares à direção da gravidade o único comportamento observado é um ruído sem memória em torno da média para baixos números de Péclet e um valor constante igual a zero para altos Péclets.

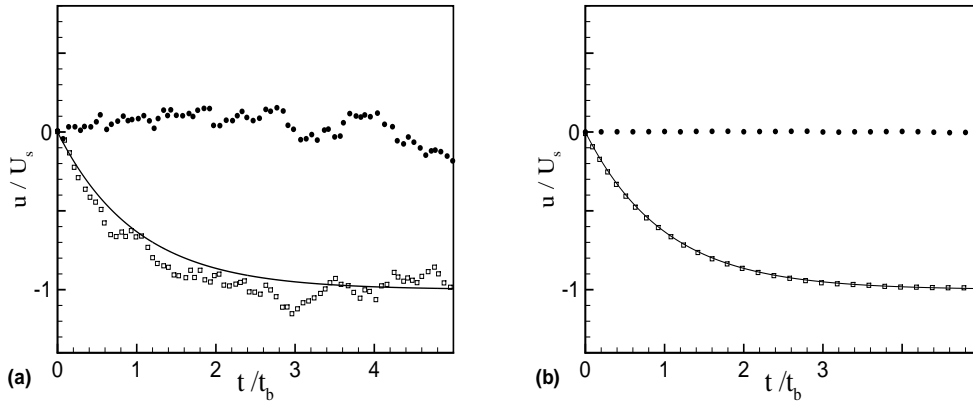


Figura 3.6: Relaxação da partícula com $St=0.1$ para condição de (a) $Pe=0.01$ e (b) $Pe=10$. A linha cheia representa a solução da equação diferencial do movimento de uma partícula com inércia sedimentando em um fluido viscoso em um escoamento com $Re \rightarrow 0$ na ausência de movimento Browniano, os quadrados vazios representam a solução numérica na direção paralela à da gravidade e os círculos preenchidos denotam a solução numérica em uma das direções perpendiculares à gravidade.

3.3.5 Função autocorrelação de velocidades

A fim de verificar a correlação entre os *kicks* randômicos impostos numericamente à partícula na solução da equação estocástica de Langevin, foi analisada a função autocorrelação de velocidades normalizada, expressa por:

$$R(t) = \frac{\langle u'(t)u'(t + \tau) \rangle}{\langle u'(\tau)u'(\tau) \rangle}, \quad (3.23)$$

esta função indica o quanto um evento está relacionado a outro, em outras palavras ela informa o grau de correlação entre dois valores quaisquer de uma variável aleatória. Sabe-se que o movimento browniano é um processo sem memória, no qual a velocidade da partícula em um

instante de tempo não possui relação com a velocidade da mesma em instantes posteriores, ou seja, a velocidade da partícula em um instante de tempo t qualquer não depende do histórico do movimento. A figura (3.7) indica a decorrelação total da velocidade da partícula em

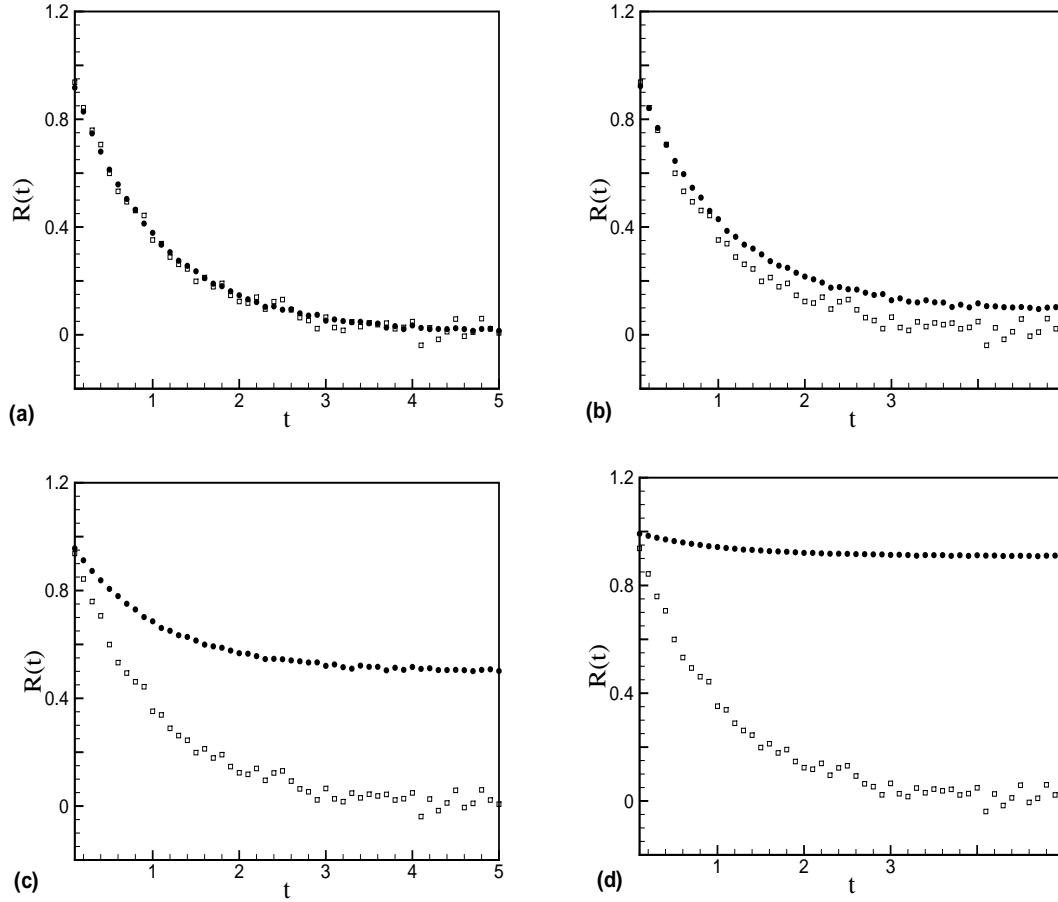


Figura 3.7: Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade para (a) $Pe=0.01$, (b) $Pe=0.1$, (c) $Pe=1$ e (d) $Pe=10$. O quadrado vazio denota uma das direções perpendiculares à da gravidade enquanto o círculo cheio representa a direção paralela à da gravidade. É possível observar que as flutuações de velocidade na direção paralela à da gravidade não se decorrelacionam com o tempo para maiores Péclets, indicando um comportamento determinístico destas, causado pela gravidade.

instantes de tempo superiores ao tempo de correlação, onde $R(t) \rightarrow 0$ para regimes de pequenos números de Péclet. A partir do momento em que o número de Péclet é grande o suficiente para que o movimento determinístico de queda livre imposto pela gravidade seja predominante sobre o movimento browniano a função autocorrelação tende a 1, indicando uma correlação evidente entre a velocidade da partícula em diferentes instantes de tempo, em outras palavras, isto informa que a velocidade da partícula passa a depender do histórico do movimento, característica conhecida de movimentos determinísticos.

3.3.6 Tempo de correlação

O tempo de correlação adimensional de um processo estocástico pode ser determinado em termos da função autocorrelação de velocidades normalizada. O mesmo é definido por:

$$\tau_c(t) = \int_0^t R(\tau) d\tau. \quad (3.24)$$

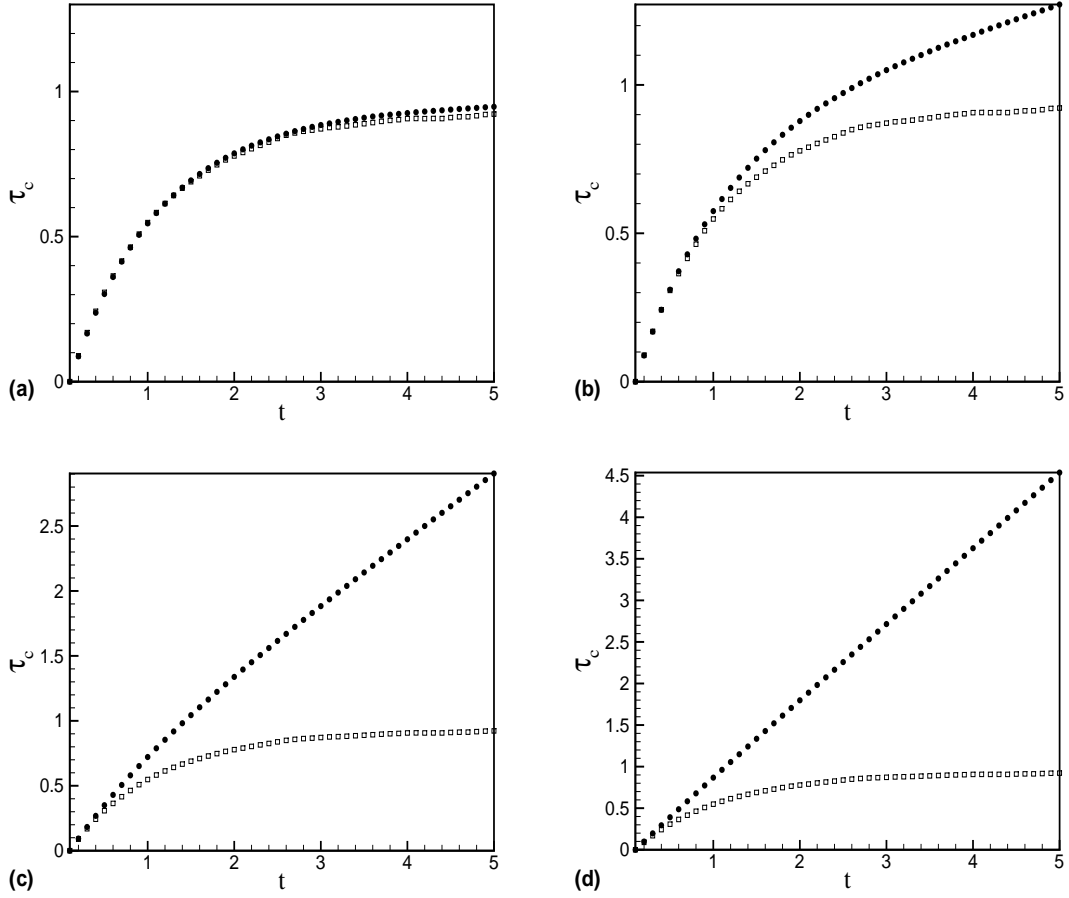


Figura 3.8: Tempo de correlação do sistema para (a) $Pe=0.01$, (b) $Pe=0.1$, (c) $Pe=1$ e (d) $Pe=10$. O quadrado vazio denota uma das direções perpendiculares à da gravidade enquanto o círculo cheio representa a direção paralela à da gravidade. É possível observar que o tempo de correlação na direção paralela à da gravidade não satura com o tempo para maiores Péclets, indicando um comportamento determinístico do sistema nesta direção, causado pela gravidade.

É possível observar pela figura (3.8) que o tempo de correlação adimensional tende a 1 para condições nas quais este satura com o tempo. Este é o tempo necessário para que o processo contenha um número suficientemente grande de eventos a fim de que alguma estatística de longo tempo associada a um processo não determinístico possa ser inferida. Nota-se também que não existe um tempo de correlação browniano na direção da gravidade

para regimes de altos Péclets, visto que nestas condições o movimento dominante é aquele determinístico imposto pela aceleração gravitacional.

A análise realizada neste capítulo teve como objetivo interpretar características básicas do movimento Browniano ao qual partículas de tamanho nanométrico em uma suspensão líquido-sólido estão sujeitas devido aos encontros randômicos entre milhares de moléculas do fluido base e as susperfícies destas. Por mais que este seja um assunto bem conhecido na literatura, uma validação das implementações numéricas associadas à quantificação de forças e torques Brownianos a partir do comportamento físico de uma única partícula sujeita a este tipo de forças somadas ao arrasto viscoso é de fundamental importância em um trabalho como este, no qual pretende-se propor uma metodologia de simulação computacional aplicável à solução dinâmica do movimento de partículas magnéticas tanto em suspensões de esferas de tamanho micrométrico (não-coloidais) quanto de tamanho nanométrico (coloidais).

O capítulo seguinte tem como objetivo interpretar alguns aspectos específicos sobre a física de suspensões magnéticas diluídas através da análise do problema de duas partículas sujeitas a interações hidrodinâmicas e magnéticas, estas últimas aplicáveis para força e torque.

3.4 Uma breve discussão sobre as forças transientes atuantes em uma partícula isolada

Antes de adicionar outras partículas ao problema que irão gerar novas forças de interação partícula-partícula, uma breve discussão acerca das forças transientes que atuam em uma partícula isolada devido à interação fluido-partícula é importante. Essa discussão é baseada no trabalho de Sobral et al. (2007) no qual os autores avaliaram a ordem de magnitude das forças de interação fluido-partícula que atuam em uma partícula isolada sujeita à ação líquida da gravidade.

A equação de Navier-Stokes, responsável por reger o movimento de um fluido incompressível é dada por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \quad (3.25)$$

através de um balanço do termo de pressão com cada um dos outros termos podemos notar que uma partícula imersa em um fluido está sujeita à diversas forças de interação fluido-partícula. Já foi visto em capítulos anteriores que a versão adimensional da equação (3.25) utilizando como escala típica de tempo l_0/u_0 , em que l_0 representa um comprimento característico do escoamento e u_0 uma velocidade típica deste, é dada para um fluido não magnético por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Fr} \mathbf{g}, \quad (3.26)$$

em que Fr representa o número de Froude, definido por $Fr = gl_0/u_0^2$. Note que diferentemente da adimensionalização utilizada no capítulo referente às Equações de Balanço desta Tese, aqui o termo de gravidade não se encontra dentro do termo de pressão e foi representado explicitamente, pois o objetivo desta análise é discutir as forças que atuam em uma partícula imersa em um fluido sedimentando sob a ação da gravidade.

Deste modo para um escoamento em baixo número de Reynolds induzido pelo movimento de uma única partícula, temos que os termos de difusão viscosa de quantidade de movimento e o termo de pressão se balanceiam, desta forma via análise de escala é possível determinar uma escala típica para força de arrasto atuante na partícula devido ao escoamento induzido. Esta força é dada por $\mathbf{f}_s \sim \eta l_0 \mathbf{u}$, neste contexto o sub-índice s denota a força de arrasto de Stokes, já que para uma partícula rígida esférica, Stokes determinou analiticamente a expressão para esta força de arrasto, dada por $\mathbf{f}_s = 6\pi\eta a \mathbf{v}$, em que \mathbf{v} representa a velocidade do centro de massa da partícula.

Realizando um balanço entre o termo não linear $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ e o termo de pressão, obtemos uma escala típica para a força atuante em uma partícula fluida devido à inércia do fluido, dada por $\mathbf{f}_o \sim \rho l_0^2 u_0^2$. Esta força associada ao termo de inércia é não linear em termos da velocidade e fortemente dependente da geometria do corpo inserido no escoamento, já que escala com l_0^2 . Oseen (1910) determinou analiticamente a expressão para esta força para condições de números de Reynolds $\mathcal{O}(1)$. Esta força é dada por

$$\mathbf{f}_o = \frac{9}{4}\pi a^2 \rho |\mathbf{v}| \mathbf{v}. \quad (3.27)$$

Considerando agora um balanço entre o termo transiente e o gradiente de pressão, podemos obter uma escala típica para uma força atuante na partícula dependente de uma escala de tempo τ_p típica do movimento da partícula, dada por $\mathbf{f}_{mv} \sim \rho l_0^3 u_0 / \tau_p$. Resolvendo o escoamento potencial em torno de uma esfera (Batchelor, 1967) esta força transiente é chamada de arrasto de massa virtual e é dada por

$$\mathbf{f}_{mv} = \frac{2}{3}\pi a^3 \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt}. \quad (3.28)$$

Entretanto uma outra força de arrasto transiente surge devido à interação fluido partícula. Esta força foi determinada por Basset (1888) desprezando o termo de inércia não linear e pode ser calculada utilizando tanto harmônicos esféricos quanto transformadas de Fourier e é dada por

$$\mathbf{f}_b = 6a^2 \sqrt{\pi\rho\eta} \int_0^t \frac{d\mathbf{v}}{dt} \Big|_{t=\zeta} \frac{1}{t-\zeta} d\zeta, \quad (3.29)$$

esta força está associada a toda a história do processo de aceleração da partícula ao longo de um fluido viscoso e representa um arrasto de memória ao qual a partícula está submetida devido à termos de inércia transiente do fluido. Finalmente a partícula ainda está sujeita à uma força de empuxo líquido gravitacional que leva ao processo de sedimentação, responsável

pela geração das outras forças de interação fluido-partícula e pelo próprio escoamento induzido. Desta forma a segunda lei de Newton, representando o movimento de uma partícula isolada imersa em um fluido viscoso é dada por

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 6\pi\eta a \mathbf{v} + \frac{9}{4}\pi a^2 \rho |\mathbf{v}| \mathbf{v} + \frac{2}{3}\pi a^3 \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + 6a^2 \sqrt{\pi\rho\eta} \int_0^t \frac{d\mathbf{v}}{dt} \frac{1}{t-\zeta} d\zeta + \frac{4\pi a^3}{3} \Delta\rho \mathbf{g}. \quad (3.30)$$

Em um trabalho recente, Sobral et al. (2007) fizeram um estudo detalhado acerca da ordem de magnitude de cada uma das forças expressas na equação (3.30). Neste trabalho os autores verificaram que conforme a razão de massa específica ρ_s/ρ_f aumenta, em que ρ_s denota a massa específica da partícula e ρ_f representa a massa específica do fluido, a importância relativa das forças de Oseen (1910), arrasto virtual e Basset (1888) diminui em relação ao arrasto de Stokes.

Neste trabalho qualquer efeito de inércia do fluido será desprezado, já que as partículas magnéticas se movimentam em regimes de baixos números de Reynolds, de modo que os termos associados ao arrasto de Basset (1888), Oseen (1910) e massa virtual serão de pequena importância, apenas o arrasto de Stokes será considerado. Além disso em alguns casos será considerado um pequeno efeito de inércia de partícula, $St \ll 1$, porém diferente de zero. É importante falar que podemos considerar $Re \rightarrow 0$ com $St \neq 0$. A relação entre a inércia da partícula e a inércia do fluido, representada aqui pelos números de Stokes e Reynolds respectivamente é dada em termos de escala por

$$\frac{St}{Re} \sim \frac{\rho_s}{\rho_f}, \quad (3.31)$$

como para suspensões magnéticas a razão de massa específica é $\mathcal{O}(10)$, podemos ter por exemplo $St \sim 0.1$ com $Re \sim 0.01$, que em termos práticos é extremamente pequeno, de modo que apenas o arrasto de Stokes domina a interação fluido-partícula. É importante falar que tudo isso é válido para uma partícula isolada. Para um sistema com muitos corpos a interação hidrodinâmica entre as partículas é um mecanismo muito importante e será considerada em seções futuras.

Em todos os momentos ao longo das próximas seções qualquer pequeno efeito de inércia a ser considerado será exclusivamente da partícula e nunca do fluido, de modo que qualquer efeito de arrasto transiente proveniente da inércia do fluido não será considerado. Essa desconsideração não invalida nenhum resultado obtido, já que em termos práticos a massa específica das partículas que compõe uma suspensão magnética costuma ser da ordem de 7 vezes a massa específica do fluido base. Desta forma é possível ter um pequeno efeito de inércia de partícula sem efeitos de inércia do fluido.

Capítulo 4 PROBLEMA ENVOLVENDO DUAS PARTÍCULAS

4.1 Descrição matemática

O estudo do problema de duas partículas é de extrema importância para se compreender a física de suspensões coloidais magnéticas diluídas, nas quais as interações magnéticas e hidrodinâmicas entre pares de partículas dominam. A realidade física a ser estudada consiste em duas esferas de diferentes diâmetros e massas específicas, imersas em um fluido viscoso interagindo magneticamente, considerando efeitos de inércia de partícula ($St \neq 0$) e efeitos Brownianos devido ao tamanho reduzido das partículas estudadas. Um desenho esquemático do sistema estudado é mostrado na figura (4.1). Com base nessa realidade física a equação

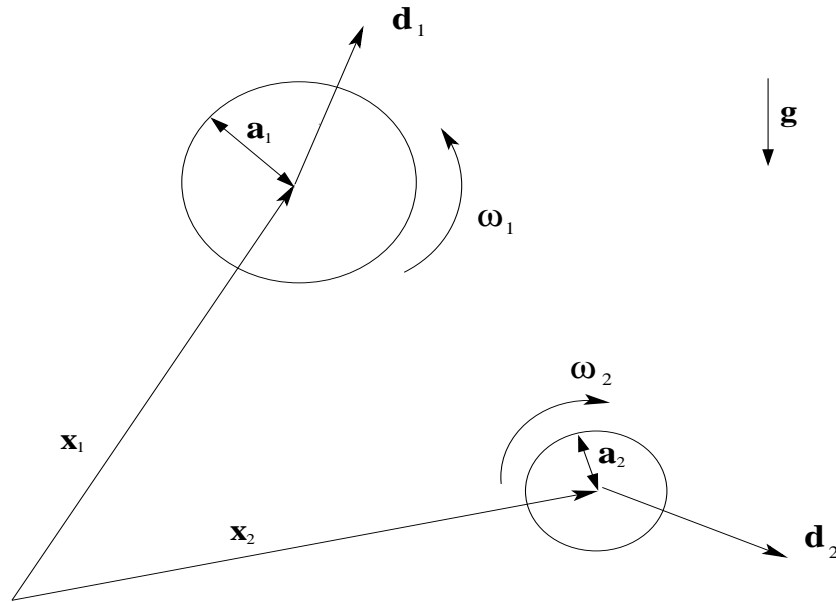


Figura 4.1: Esquema do problema de duas partículas

que descreve o movimento de cada partícula é dada por

$$m_1 \frac{d\mathbf{u}_1}{dt} = \Delta\rho_1 \mathbf{g} \frac{4}{3} \pi a_1^3 + 6\pi\eta a_1 \left(\frac{6D_t}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_{h1} + \mathbf{f}_m, \quad (4.1)$$

$$m_2 \frac{d\mathbf{u}_2}{dt} = \Delta\rho_2 \mathbf{g} \frac{4}{3} \pi a_2^3 + 6\pi\eta a_2 \left(\frac{6D_t}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_{h2} + \mathbf{f}_m, \quad (4.2)$$

em que a equação (4.1) representa o movimento da partícula 1 e a equação (4.2) diz respeito à partícula 2. Nesse caso, têm-se que

$$\Delta\rho_1 = \rho_1 - \rho_f \quad \text{e} \quad \Delta\rho_2 = \rho_2 - \rho_f, \quad (4.3)$$

em que ρ_f representa a massa específica do fluido. Adimensionalizando as equações (4.1) e (4.2), utilizando como escala de velocidade a velocidade de Stokes da esfera 1 e como escala de tempo a relação a_1/U_{s1} , as equações adimensionais para as duas esferas se tornam

$$St \frac{d\mathbf{u}_1}{dt} = \mathbf{g} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_{h1}^* + \mathbf{f}_m^*, \quad (4.4)$$

$$\frac{1}{\lambda\beta^3} St \frac{d\mathbf{u}_2}{dt} = \frac{1}{\gamma\beta^3} \mathbf{g} + \frac{1}{\beta^{1/2}} \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_{h2}^* + \mathbf{f}_m^*, \quad (4.5)$$

em que

$$\beta = \frac{a_1}{a_2}, \quad \lambda = \frac{\rho_1}{\rho_2} \quad \text{e} \quad \gamma = \frac{\Delta\rho_1}{\Delta\rho_2}, \quad (4.6)$$

nas equações (4.4) e (4.5) os parâmetros adimensionais são determinados utilizando como referência a esfera 1. As forças por interações hidrodinâmicas dependem somente da configuração das esferas e um estudo detalhado a cerca das forças que atuam nas esferas devido à interações hidrodinâmicas é dado por Jeffrey e Onishi (1983). Neste estudo o método das reflexões foi utilizado para se determinar com precisão as forças que atuam em cada uma das esferas devido à interações hidrodinâmicas e maiores detalhes sobre a determinação destas forças podem ser encontrados na seção (4.1.2) da presente tese.

4.1.1 Forças magnéticas

Considere um pequeno elemento de uma substância polarizada magneticamente sujeita a aplicação de um campo magnético externo conforme ilustrado na figura (4.2).

Consideraremos nesta análise que o vetor magnetização \mathbf{M} encontra-se alinhado com o eixo de simetria do elemento na direção \mathbf{d} . Este material magnetizado é submetido a um campo magnético externo \mathbf{H}_0 , de modo que polos magnéticos de densidade $\rho_s = \mu_0 M$ surgem em mesma quantidade e com sinais opostos nas áreas laterais a_d . É importante lembrar que um monopolo magnético é uma estrutura física inexistente, e isto é uma consequência direta da lei de Gauss do magnetismo, desta forma qualquer elemento infinitesimal magnetizado possui como estrutura magnética mais simples possível o dipolo magnético. Pela figura (4.2) nota-se também que um elemento infinitesimal de volume é dado por $\delta V = a_d d$. Como o campo magnético externo aplicado pode ser interpretado como uma força magnética por polo magnético, têm-se que a força sobre o elemento infinitesimal é dada por

$$-\mathbf{H}_0 \rho_s a_d + (\mathbf{H}_0 + \delta\mathbf{H}_0) \rho_s a_d = \delta\mathbf{H}_0 \rho_s a_d, \quad (4.7)$$

em que $\delta\mathbf{H}_0$ representa a variação do campo externo aplicado ao longo da direção \mathbf{d} . Pode-se escrever o termo $\delta\mathbf{H}_0$ como

$$\delta\mathbf{H}_0 = (\mathbf{d} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 = \left(\frac{d}{M} \right) (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0, \quad (4.8)$$

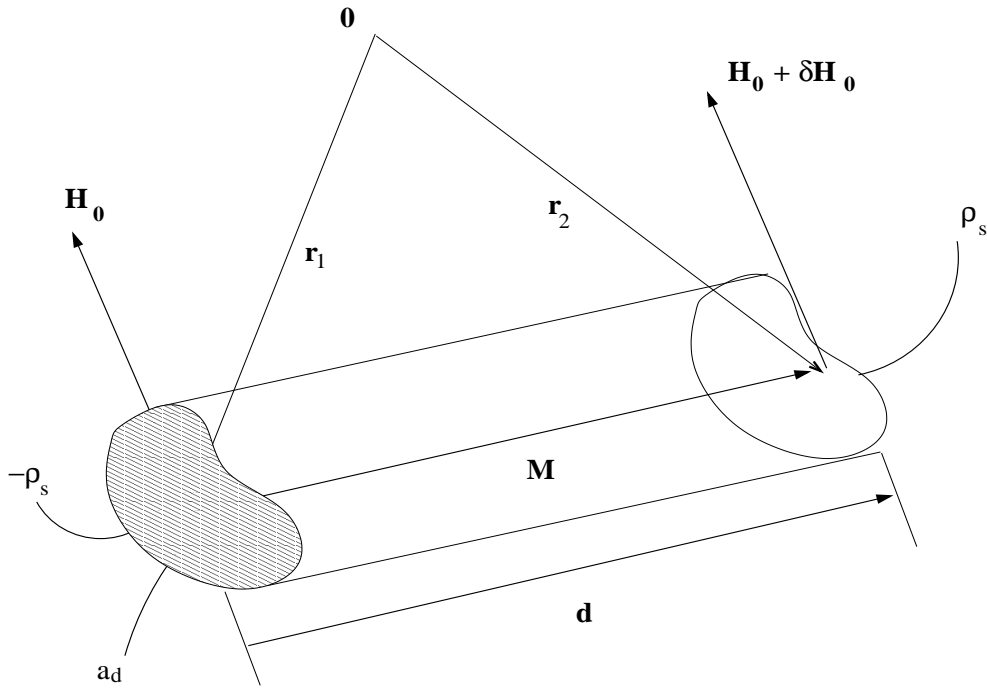


Figura 4.2: Forças magnéticas devido a aplicação de um campo magnético em um pequeno elemento magnetizado

desta forma têm-se

$$\delta \mathbf{H}_0 \rho_s a_d = \rho_s a_d \left(\frac{d}{M} \right) (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0, \quad (4.9)$$

mas o momento de dipolo magnético é definido por $\mathbf{m} = \rho_s a_d \mathbf{d} = \mu_0 \mathbf{M} a_d \mathbf{d}$, de onde se conclui que $\rho_s = \mu_0 M$, combinando a definição do momento de dipolo magnético com a equação (4.9) têm-se que a força por unidade de volume que atua sobre o elemento é dada por

$$\frac{\mathbf{f}_m}{\delta V} = \mu_0 (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0. \quad (4.10)$$

A dedução de um torque magnético que age sobre o elemento magnetizado na presença de um campo externo é feita de maneira análoga. Neste caso consideramos que o campo magnético imposto é uniforme espacialmente, de modo que $\delta \mathbf{H}_0 = \mathbf{0}$. Considerando que um vetor \mathbf{r}_1 é definido na face sul do elemento e um vetor \mathbf{r}_2 na face norte, de modo que $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{d}$, têm-se que o torque é dado por

$$\delta \mathbf{T} = \rho_s a_d (-\mathbf{r}_1 \times \mathbf{H}_0 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{H}_0) = \rho_s a_d \mathbf{d} \times \mathbf{H}_0, \quad (4.11)$$

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

$$\frac{\mathbf{T}_m}{\delta V} = \mu_0 \mathbf{M} \times \mathbf{H}_0 \quad (4.12)$$

a equação (4.12) estabelece que quando o vetor magnetização encontra-se alinhado com o vetor campo magnético o elemento encontra-se na ausência de torques magnéticos. As expressões (4.10) e (4.12) estabelecem as forças e torques magnéticos que atuam sobre partículas magnéticas imersas em um fluido base devido à interação entre o momento de

dipolo magnético da partícula e um campo externo aplicado. Porém, em suspensões coloidais magnéticas, as partículas interagem com um campo externo aplicado e com as outras partículas que compõe a suspensão. Veremos agora como determinar o potencial de interação entre momentos de dipolo magnéticos.

Quando um pequeno elemento de matéria é polarizado um polo magnético positivo surge em uma das extremidades e um polo negativo na outra, por definição este pequeno elemento forma um dipolo magnético, que é a estrutura magnética mais simples possível de ser formada, já que a lei de Gauss do magnetismo garante a inexistência de um monopolo magnético. Considere a figura (4.3), onde a orientação do momento de dipolo ilustrado é representada pelo vetor \mathbf{d} .

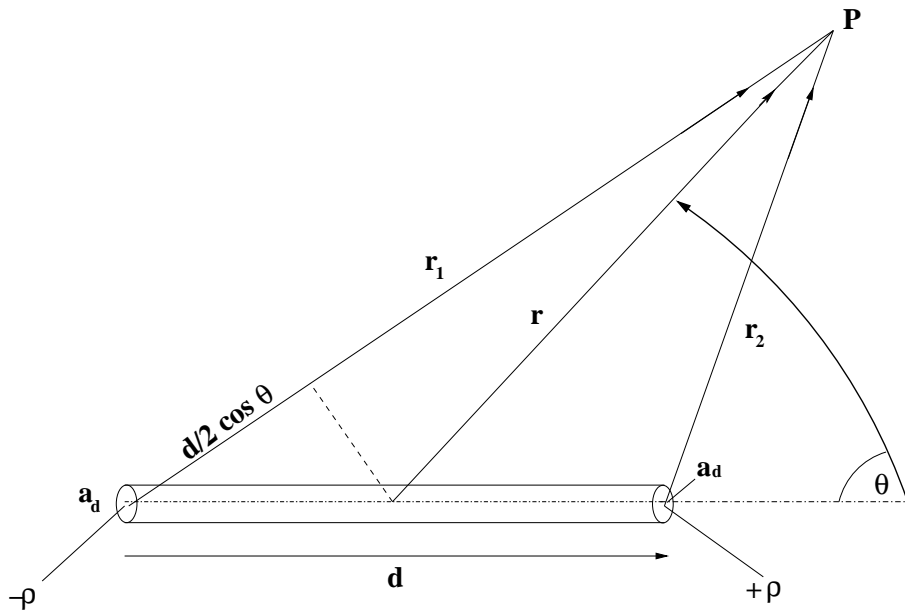


Figura 4.3: Campo magnético devido a presença de um dipolo magnético

Adotando a idéia de que o campo magnético no ponto P devido à presença do dipolo pode ser encontrado utilizando o princípio da superposição e utilizando a lei de Coulomb, temos que

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\rho_s a_d}{4\pi\mu_0} \left(\frac{-\mathbf{r}_1}{r_1^3} + \frac{\mathbf{r}_2}{r_2^3} \right), \quad (4.13)$$

além disso, por considerações geométricas, sabe-se que $\mathbf{r}_1 = 1/2\mathbf{d} + \mathbf{r}$ e $\mathbf{r}_2 = -1/2\mathbf{d} + \mathbf{r}$. No limite em que $d \ll r$ uma boa aproximação para as distâncias r_1 e r_2 é dada por

$$r_1 \approx r + \frac{d}{2} \cos \theta \quad \text{e} \quad r_2 \approx r - \frac{d}{2} \cos \theta, \quad (4.14)$$

expandindo $1/r_1^3$ utilizando o teorema binomial, têm-se

$$\frac{1}{r_1^3} \approx \left(r + \frac{d}{2r} \cos \theta \right)^{-3} = \frac{1}{r_1^3} \left(1 + \frac{d}{2} \cos \theta \right)^{-3} \approx \frac{1}{r_1^3} \left(1 - \frac{3d}{2r} \cos \theta \right), \quad (4.15)$$

de forma análoga para $1/r_2^3$ têm-se

$$\frac{1}{r_2^3} \approx \frac{1}{r_2^3} \left(1 + \frac{3d}{2r} \cos \theta \right), \quad (4.16)$$

desta forma

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) \approx \frac{\rho_s a_d}{4\pi\mu_0 r^3} \left[\left(-\frac{1}{2}\mathbf{d} - \mathbf{r} \right) \left(1 - \frac{3d}{2r} \cos \theta \right) + \left(-\frac{1}{2}\mathbf{d} + \mathbf{r} \right) \left(1 + \frac{3d}{2r} \cos \theta \right) \right], \quad (4.17)$$

simplificando a equação (4.17) e tendo em mente que $\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \cos \theta$, $\rho_s = \mu_0 M$ e $V = a_d d$, têm-se

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) \approx \frac{MV}{4\pi r^3} \left[-\hat{\mathbf{d}} + 3(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} \right]. \quad (4.18)$$

Considere dois dipolos magnéticos com volumes V_1 e V_2 e magnetizações \mathbf{M}_1 e \mathbf{M}_2 respectivamente, separados por uma distância r , conforme ilustra a figura (4.4).

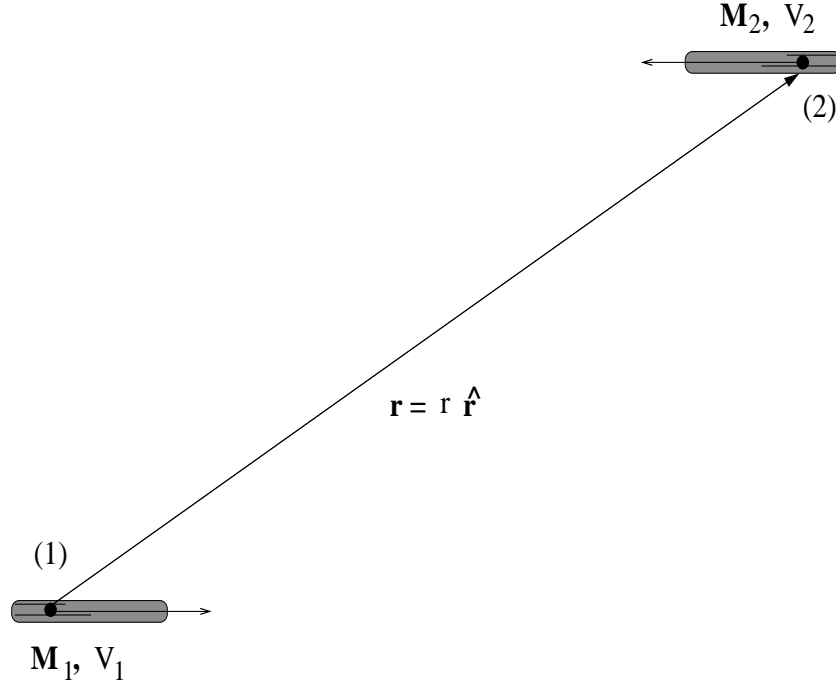


Figura 4.4: Interação entre dois momentos de dipolo magnéticos

Como demonstrado anteriormente a força por unidade de volume que atua sobre um elemento de dipolo magnético devido a aplicação de um campo externo \mathbf{H}_0 é dada pela equação (4.10), que pode ser reescrita utilizando a definição de momento de dipolo magnético da forma

$$\mathbf{f}_m = (\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0, \quad (4.19)$$

utilizando a identidade vetorial dada por

$$(\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 = \nabla (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0) - \mathbf{H}_0 \cdot \nabla \mathbf{m} - \mathbf{m} \times (\nabla \times \mathbf{H}_0) - \mathbf{H}_0 \times (\nabla \times \mathbf{m}), \quad (4.20)$$

para o caso de \mathbf{m} constante, temos

$$(\mathbf{m} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 = \nabla (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0) - \mathbf{m} \times (\nabla \times \mathbf{H}_0), \quad (4.21)$$

sabe-se que no limite magnetoestático $\nabla \times \mathbf{H}_0 = \mathbf{0}$, desta forma

$$\mathbf{f}_m = \nabla (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0) = -\nabla \Phi_m, \quad (4.22)$$

com

$$\Phi_m = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_0. \quad (4.23)$$

Utilizando (4.18), o campo magnético que o dipolo 2 sente devido a presença do dipolo 1 é dado por

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{M_1 V_1}{4\pi r^3} \left[-\hat{\mathbf{d}}_1 + 3 \left(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}} \right) \hat{\mathbf{r}} \right], \quad (4.24)$$

combinando a expressão (4.24) com a equação (4.23) e utilizando a relação $\mathbf{m}_2 = \mu_0 \mathbf{M}_2 V_2 = \mu_0 M_2 V_2 \hat{\mathbf{d}}_2$, têm-se

$$\Phi_m = \frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r_3} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3 \left(\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}} \right) \left(\hat{\mathbf{d}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}} \right) \right]. \quad (4.25)$$

As forças por interação magnética são determinadas então a partir do cálculo do gradiente do potencial de interação entre dois dipolos magnéticos e após o processo de adimensionalização a mesma é dada por

$$\mathbf{f}_m^* = \frac{\Psi_m}{r_{ij}^4} \sum_{i \neq j} \left[(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] + [\varphi_m \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h}], \quad (4.26)$$

em que Ψ_m e φ_m constituem parâmetros magnéticos, dados por

$$\Psi_m = \frac{\mu_0 m_d^2}{8\pi^2 \eta a_1^5 U_s}, \quad (4.27)$$

e

$$\varphi_m = \frac{m_d H_0}{6\pi \eta a_1^2 U_s}. \quad (4.28)$$

A força de interação campo-partícula, último termo da equação (4.26) é obtida pela determinação do gradiente do potencial de interação magnética entre o campo externo e uma partícula i da suspensão, dado por

$$\Psi_{mh} = -\mu_0 m_i H_0 \left(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}} \right) \quad (4.29)$$

Maiores detalhes sobre a obtenção do potencial de interação campo-partícula são dados em Rosensweig (1985) e sobre o processo de obtenção da equação (4.26) podem ser encontrados no *Apêndice B* desta Tese. A equação que descreve o comportamento da velocidade angular

de cada partícula ao longo do processo evolutivo de sedimentação consiste na equação do momento da quantidade de movimento. Em termos dimensionais esta equação é dada para as partículas 1 e 2 respectivamente por

$$J_1 \frac{d\boldsymbol{\omega}_1}{dt} = -8\pi\eta a_1^3 \boldsymbol{\omega}_1 + 8\pi\eta a_1^3 \left(\frac{6D_{r1}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}_m, \quad (4.30)$$

$$J_2 \frac{d\boldsymbol{\omega}_2}{dt} = -8\pi\eta a_2^3 \boldsymbol{\omega}_2 + 8\pi\eta a_2^3 \left(\frac{6D_{r2}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}_m, \quad (4.31)$$

nesta formulação não são considerados torques por interações hidrodinâmicas. Utilizando como escala de referência para a velocidade angular a relação U_{s1}/a_1 e como escala de tempo a relação a_1/U_{s1} da esfera 1, têm-se que o sistema de equações adimensional é dado por

$$St_R \frac{d\boldsymbol{\omega}_1}{dt} = -\boldsymbol{\omega}_1 + \left(\frac{6}{Pe_R \delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}_m^* \quad (4.32)$$

$$\frac{1}{\psi} St_R \frac{d\boldsymbol{\omega}_2}{dt} = -\frac{1}{\beta^3} \boldsymbol{\omega}_2 + \frac{1}{\beta^{3/2}} \left(\frac{6}{Pe_R \delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}_m^*, \quad (4.33)$$

em que

$$\psi = \frac{J_1}{J_2} = \frac{a_1^4}{a_2^4} = \beta^4 \quad (4.34)$$

representa a relação entre o momento de inércia polar das esferas 2 e 1 respectivamente. O torque magnético adimensional é dado por

$$\mathbf{T}_m^* = \frac{3\Psi_m}{4r_{ij}^3} \sum_{i \neq j} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \left[\varphi_m (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{h}}) \right], \quad (4.35)$$

Maiores detalhes do processo de obtenção da equação (4.35) são dados no *Apêndice B* desta Tese.

4.1.2 Construção dos tensores resistência para o problema de duas partículas esféricas bidispersas

Esta seção tem por base o trabalho de Jeffrey e Onishi (1983). Neste trabalho os autores determinaram os tensores resistência e mobilidade para duas esferas de diâmetros diferentes que interagem hidrodinamicamente. O ponto de partida da análise é fundamentado na linearidade das equações de Stokes. Esta linearidade implica que a força hidrodinâmica que age sobre uma esfera na presença de outra é proporcional a velocidade da esfera que gera o distúrbio. A relação de proporcionalidade consiste no tensor resistência que acopla o efeito da velocidade de uma esfera j na força hidrodinâmica que age sobre uma esfera i e vice-versa.

Em outras palavras pode-se escrever:

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \eta \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \bar{B}_{11} & \bar{B}_{12} \\ A_{21} & A_{22} & \bar{B}_{21} & \bar{B}_{22} \\ B_{11} & B_{12} & C_{11} & C_{12} \\ B_{21} & B_{22} & C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 - u^\infty(x_1) \\ u_2 - u^\infty(x_2) \\ \Omega_1 - \Omega \\ \Omega_2 - \Omega \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Na equação (4.36) cada termo da matriz 4×4 é na verdade um tensor de segunda ordem. A matriz resistência é simétrica e isto é uma consequência direta do teorema recíproco de Lorentz. Os elementos desta matriz obedecem certas condições de simetria, algumas que se aplicam a partículas de qualquer geometria e outras que surgem como consequência do problema de duas partículas esféricas. Estas relações de simetria podem ser expressas em notação indicial como:

$$A_{ij}^{\alpha\beta} = A_{ji}^{\beta\alpha}, \quad \bar{B}_{ij}^{\alpha\beta} = B_{ji}^{\beta\alpha}, \quad C_{ij}^{\alpha\beta} = C_{ji}^{\beta\alpha}. \quad (4.37)$$

Na equação (4.37) os índices inferiores se referem aos índices utilizados na notação indicial e indicam que A , B e C são tensores de segunda ordem, enquanto que os índices superiores identificam a posição que estes tensores ocupam na matriz resistência. As relações de simetria expressas em (4.37) independem da geometria das partículas. As próximas relações de simetria estão relacionadas à geometria do problema de duas partículas esféricas, são elas:

$$\mathbf{R}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, a, b) = \mathbf{R}_{(3-\alpha)(3-\beta)}(-\mathbf{r}, b, a), \quad (4.38)$$

em que \mathbf{R} representa qualquer tensor de segunda ordem que constitui a matriz resistência, \mathbf{r} é a distância entre os centros das esferas, a representa o raio da esfera 1 e b o raio da esfera 2. Cada tensor na matriz resistência é axisimétrico com relação ao vetor \mathbf{r} , sendo assim, Brenner (1963,1964) deduz que estes tensores podem ser expressos em termos de no máximo duas funções escalares. Assim, os tensores A , B e C são expressos em termos de funções escalares e de combinações do tensor identidade com o diádico $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}$ em que $\hat{\mathbf{r}}$ representa o vetor \mathbf{r} normalizado, da seguinte forma:

$$A_{ij}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^A \hat{r}_i \hat{r}_j + Y_{\alpha\beta}^A (\delta_{ij} - \hat{r}_i \hat{r}_j) \quad (4.39)$$

$$B_{ij}^{\alpha\beta} = \bar{B}_{ji}^{\beta\alpha} = Y_{\alpha\beta}^B \epsilon_{ijk} \hat{r}_k \quad (4.40)$$

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^C \hat{r}_i \hat{r}_j + Y_{\alpha\beta}^C (\delta_{ij} - \hat{r}_i \hat{r}_j). \quad (4.41)$$

O próximo passo consiste na adimensionalização dos tensores que compõe a matriz resistência. Jeffrey e Onishi (1983) adotam a adimensionalização proposta por Batchelor (1976) em que os tensores adimensionais são dados por:

$$\hat{\mathbf{A}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{A}_{\alpha\beta}}{3\pi(a+b)}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{B}_{\alpha\beta}}{\pi(a+b)^2}, \quad \hat{\mathbf{C}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{C}_{\alpha\beta}}{\pi(a+b)^3}. \quad (4.42)$$

Os tensores adimensionais são expressos em termos de funções escalares adimensionais. As funções $X_{\alpha\beta}^A$, $Y_{\alpha\beta}^A$, $Y_{\alpha\beta}^B$, $X_{\alpha\beta}^C$ e $Y_{\alpha\beta}^C$ dependem da distância entre o centro das esferas adimensional e da razão entre os diâmetros das esferas, estes parâmetros são definidos como:

$$s = \frac{2r}{a+b}, \quad \lambda = \frac{b}{a}, \quad (4.43)$$

tendo definido todos os parâmetros do problema, as condições de simetria anteriormente expressas fornecem:

$$X_{\alpha\beta}^A(s, \lambda) = X_{\beta\alpha}^A(s, \lambda) = X_{(3-\alpha)(3-\beta)}^A(s, \lambda^{-1}) \quad (4.44)$$

$$Y_{\alpha\beta}^A(s, \lambda) = Y_{\beta\alpha}^A(s, \lambda) = Y_{(3-\alpha)(3-\beta)}^A(s, \lambda^{-1}) \quad (4.45)$$

$$Y_{\alpha\beta}^B(s, \lambda) = -Y_{(3-\alpha)(3-\beta)}^B(s, \lambda^{-1}) \quad (4.46)$$

$$X_{\alpha\beta}^C(s, \lambda) = X_{\beta\alpha}^C(s, \lambda) = X_{(3-\alpha)(3-\beta)}^C(s, \lambda^{-1}) \quad (4.47)$$

$$Y_{\alpha\beta}^C(s, \lambda) = Y_{\beta\alpha}^C(s, \lambda) = Y_{(3-\alpha)(3-\beta)}^C(s, \lambda^{-1}). \quad (4.48)$$

Utilizando uma variante do método das reflexões, denominada *twin multipole expansions*, Jeffrey e Onishi (1983) determinaram as funções escalares para montagem dos tensores resistência nos limites assintóticos em que as esferas encontram-se separadas por uma distância muito maior que o raio de uma das esferas e no limite assintótico em que ambas encontram-se próximas utilizando teoria da lubrificação. A equação (4.36) fornece uma relação entre as forças e torques por interação hidrodinâmica atuantes em ambas as esferas devido ao movimento translacional e rotacional das mesmas. O modelo utilizado na presente tese para estudo da dinâmica de suspensões magnéticas diluídas com interações hidrodinâmicas considera apenas forças hidrodinâmicas devido à interação entre o movimento translacional das esferas, de modo que a equação (4.36) para este caso se torna

$$\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} = \eta \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Um resumo do resultado obtido por Jeffrey e Onishi (1983) é dado por:

Esferas separadas - Interação hidrodinâmica far field

$$X_{11}^A(s, \lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k}(\lambda)(1+\lambda)^{-2k} s^{-2k}, \quad (4.50)$$

$$X_{12}^A(s, \lambda) = \frac{-2}{1+\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k+1}(\lambda)(1+\lambda)^{-2k-1} s^{-2k-1}, \quad (4.51)$$

$$Y_{11}^A(s, \lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k}(\lambda)(1+\lambda)^{-2k} s^{-2k}, \quad (4.52)$$

$$Y_{12}^A(s, \lambda) = \frac{-2}{1+\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} f_{2k+1}(\lambda)(1+\lambda)^{-2k-1} s^{-2k-1}, \quad (4.53)$$

em que as funções $f_k(\lambda)$ podem ser obtidas das tabelas (4.1) e (4.2).

	f_0	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9	f_{10}	f_{11}
1	1											
λ		3	9	-4	-24		16					
λ^2				27	81	72	108	288	576	1152	2304	4608
λ^3				-4	36	243	281	1620	4848	9072	20736	46656
λ^4						72	648	1515	5409	14752	42802	108912
λ^5							144	1620	4524	26163	115849	269100
λ^6								288	3888	14752	76176	319899
λ^7									576	9072	39264	269100
λ^8										1152	20736	108912
λ^9											2304	46656
λ^{10}												4608

Tabela 4.1: Funções utilizadas no cálculo das funções resistência X_{11}^A e X_{12}^A

Esferas próximas do contato - Teoria da lubrificação

Para esferas próximas do contato as funções resistência são dadas pelas equações:

$$X_{11}^A = g_1(\lambda)\xi^{-1} + g_2(\lambda) \ln \xi^{-1} + A_{11}^X(\lambda) + g_3(\lambda)\xi \ln \xi^{-1} + L_{11}^X(\lambda)\xi + O(\xi^2 \ln \xi),$$

$$X_{12}^A = \frac{-2}{1+\lambda} \left[g_1(\lambda)\xi^{-1} + g_2(\lambda) \ln \xi^{-1} - \frac{1}{2} (1+\lambda) A_{12}^X \right] + \frac{-2}{1+\lambda} \left[g_3(\lambda)\xi \ln \xi^{-1} - \frac{1}{2} (1+\lambda) L_{12}^X(\lambda)\xi + O(\xi^2 \ln \xi) \right], \quad (4.54)$$

$$Y_{11}^A = g_4(\lambda) \ln \xi^{-1} + A_{11}^Y(\lambda) + g_5(\lambda)\xi \ln \xi^{-1} \quad (4.55)$$

$$Y_{12}^A = \frac{=2}{1+\lambda} g_4(\lambda) \ln \xi^{-1} - \frac{1}{2} (1+\lambda) A_{12}^Y(\lambda) + g_5(\lambda)\xi \ln \xi^{-1} \quad (4.56)$$

em que ξ representa a distância entre as superfícies das esferas adimensional, dada por

$$\xi = \frac{2(R-a-b)}{a+b}, \quad (4.57)$$

em que R é a distância entre os centros das esferas adimensional. As funções $g_1(\lambda)$, $g_2(\lambda)$, $g_3(\lambda)$, $g_4(\lambda)$ e $g_5(\lambda)$ são dadas por:

$$g_1(\lambda) = 2\lambda^2 (1+\lambda)^{-3} \quad (4.58)$$

$$g_2(\lambda) = \frac{1}{5}\lambda (1+7\lambda+\lambda^2) (1+\lambda)^{-3} \quad (4.59)$$

$$g_3(\lambda) = \frac{1}{42} (1+18\lambda-29\lambda^2+18\lambda^3+\lambda^4) (1+\lambda)^{-3} \quad (4.60)$$

	f_0	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	f_9	f_{10}	f_{11}
1	1											
λ		$\frac{3}{2}$	$\frac{9}{4}$	2	6		4					
λ^2				$\frac{27}{8}$	$\frac{81}{16}$	$\frac{63}{2}$	54	144	279	576	1152	2304
λ^3				2	18	$\frac{243}{32}$	$\frac{1241}{64}$	$\frac{1053}{8}$	$\frac{4261}{8}$	1134	$\frac{7857}{4}$	7128
λ^4						$\frac{63}{2}$	81	$\frac{19083}{128}$	$\frac{12639}{256}$	$\frac{60443}{32}$	$\frac{98487}{16}$	$\frac{22071}{2}$
λ^5							72	$\frac{1053}{8}$	$\frac{-117}{8}$	$\frac{766179}{512}$	$\frac{10548393}{1024}$	$\frac{2744505}{128}$
λ^6								144	658	$\frac{60443}{32}$	$\frac{67617}{8}$	$\frac{95203835}{2048}$
λ^7									288	1134	$\frac{-351}{2}$	$\frac{2744505}{128}$
λ^8										576	3888	$\frac{22071}{2}$
λ^9											1152	7128
λ^{10}												2304

Tabela 4.2: Funções utilizadas no cálculo das funções resistência Y_{11}^A e Y_{12}^A

$$g_4(\lambda) = \frac{4}{15} \lambda (2 + \lambda + 2\lambda^2) (1 + \lambda)^{-3} \quad (4.61)$$

$$g_5(\lambda) = \frac{2}{375} (16 - 45\lambda + 58\lambda^2 - 45\lambda^3 + 16\lambda^4) (1 + \lambda)^{-3} \quad (4.62)$$

as funções A_{11}^X , A_{12}^X , L_{11}^X , L_{12}^X , A_{11}^Y , A_{12}^Y são funções de λ e encontram-se disponíveis em Jeffrey e Onishi (1983).

Esferas com separação arbitrária

A determinação de forças por interações hidrodinâmicas em dois limites assintóticos distintos exige uma análise da distância entre as esferas na qual se utilizará uma ou outra expressão. A fim de combinar a formulação utilizada para grandes e pequenas separações, Jeffrey e Onishi (1983) escrevem os termos singulares em função de s de modo que o comportamento das interações *far-field* se torne muito fraco quando as esferas encontram-se próximas e de modo análogo o comportamento das interações *near-field* decaia conforme as esferas vão se distanciando. Desta forma os autores propõe expressões para a determinação das funções escalares X_{11}^A , X_{12}^A , Y_{11}^A e Y_{12}^A , válidas para separações arbitrárias em função da razão de densidade λ e da distância entre as superfícies das esferas adimensional s . Os valores das funções X_{21}^A , X_{22}^A , Y_{21}^A e Y_{22}^A são determinado com base nas relações de simetria descritas anteriormente. As expressões para estas funções válidas para separações arbitrárias entre as esferas são dadas por:

$$X_{11}^A = g_1 (1 - 4s^{-2})^{-1} - g_2 \ln(1 - 4s^{-2}) - g_3 (1 - 4s^{-2}) \ln(1 - 4s^{-2}) + f_0(\lambda) - g_1 + \sum_{m=2, m=par}^{\infty} [2^{-m} (1 + \lambda)^{-m} f_m(\lambda) - g_1 - 2m^{-1}g_2 + 4m^{-1}m_1^{-1}g_3] \left(\frac{2}{s}\right)^m \quad (4.63)$$

$$-\frac{1}{2}(1 + \lambda) X_{12}^A = \frac{2}{s}g_1 \left(1 - \frac{4}{s^2}\right)^{-1} - g_2 \ln\left(\frac{s+2}{s-2}\right) + g_3 \left(1 - \frac{4}{s^2}\right) \ln\left(\frac{s+2}{s-2}\right) + 4\frac{g_3}{s} + \sum_{m=1, m=impar}^{\infty} [2^{-m} (1 + \lambda)^{-m} f_m(\lambda) - g_1 - 2m^{-1}g_2 + 4m^{-1}m_1^{-1}g_3] \left(\frac{2}{s}\right)^m \quad (4.64)$$

$$Y_{11}^A = -g_2 \ln(1 - 4s^{-2}) - g_3 (1 - 4s^{-2}) \ln(1 - 4s^{-2}) + f_0(\lambda) + \sum_{m=2, m=par}^{\infty} [2^{-m} (1 + \lambda)^{-m} f_m(\lambda) - 2m^{-1}g_2 + 4m^{-1}m_1^{-1}g_3] \left(\frac{2}{s}\right)^m \quad (4.65)$$

$$-\frac{1}{2}(1 + \lambda) Y_{12}^A = g_2 \ln\left(\frac{s+2}{s-2}\right) + g_3 (1 - 4s^{-2}) \ln\left(\frac{s+2}{s-2}\right) + 4g_3 s^{-1} + \sum_{m=1, m=impar}^{\infty} [2^{-m} (1 + \lambda)^{-m} f_m(\lambda) - 2m^{-1}g_2 + 4m^{-1}m_1^{-1}g_3] \left(\frac{2}{s}\right)^m \quad (4.66)$$

em que

$$m_1 = -2\delta_{m2} + (m - 2)(1 - \delta_{m2}); \quad (4.67)$$

Utilizando esta metodologia de determinação das funções escalares X_{11}^A , X_{12}^A , X_{21}^A , X_{22}^A , Y_{11}^A , Y_{12}^A , Y_{21}^A e Y_{22}^A é possível construir as forças por interações hidrodinâmicas que atuam nas esferas 1 e 2, de modo que os termos \mathbf{f}_{h1}^* e \mathbf{f}_{h2}^* das equações (4.4) e (4.5) são dados por

$$\mathbf{f}_{h1}^* = \left(\frac{\beta + 1}{2\beta}\right) [\mathbf{A}_{11} \cdot \mathbf{u}_1 + \mathbf{A}_{12} \cdot \mathbf{u}_2], \quad (4.68)$$

$$\mathbf{f}_{h2}^* = \left(\frac{\beta + 1}{2\beta}\right) [\mathbf{A}_{21} \cdot \mathbf{u}_1 + \mathbf{A}_{22} \cdot \mathbf{u}_2], \quad (4.69)$$

o termo $(\beta + 1)/2\beta$ consiste em um termo que compatibiliza a adimensionalização adotada por Batchelor (1976) para o cálculo das forças hidrodinâmicas com a adimensionalização adotada no presente trabalho para a determinação das equações governantes do movimento das esferas 1 e 2.

4.2 Trajetórias relativas

A fim de se avaliar a influência das interações magnéticas entre as esferas na quebra da reversibilidade cinemática das trajetórias relativas típicas do movimento, foram definidas

duas possibilidades típicas para as configurações iniciais dos momentos de dipolo das esferas 1 e 2. Nesse contexto a esfera chamada de *esfera 1* é posicionada inicialmente na posição $\mathbf{X}_1 = (X_1^{-\infty}, Y_1^{-\infty}, Z_1^{-\infty})$, enquanto que a *esfera 2* é referenciada como *esfera de teste* e é colocada em todas as simulações em uma posição inicial na origem do sistema de coordenadas cartesiano, a posição da *esfera 2* é definida como $\mathbf{X}_2 = (X_2^{-\infty}, Y_2^{-\infty}, Z_2^{-\infty}) = \mathbf{0}$. A posição inicial da *esfera 1* varia de acordo com o caso teste analisado dentro de uma malha retangular de posições possíveis definida no plano XY no intervalo $-5 \leq X_1^{-\infty} \leq 5$ e $-5 \leq Y_1^{-\infty} \leq 5$, para valores de $Z_1^{-\infty}$ variando também de acordo com o teste realizado. Ao longo desta seção o sentido positivo do eixo Z foi adotado como sendo no sentido da aceleração da gravidade, portanto nos casos em que a esfera 1 estiver localizada acima da esfera 2, o sinal da posição inicial $Z_1^{-\infty}$ será negativo.

Com relação às condições iniciais dos momentos de dipolos das esferas 1 e 2 abordadas neste trabalho, ambas as partículas possuem vetores *momento de dipolo* unitários com diferentes possibilidades de direção de acordo com a configuração 1 e 2 representada graficamente na figura (4.5). O vetor momento de dipolo da partícula 2 é mantido sempre igual a $\mathbf{d}_2 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$. Já para a partícula 1 foram definidas duas configurações possíveis para o valor inicial do vetor momento de dipolo desta. Na configuração 1, temos que $\mathbf{d}_1 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0) = \mathbf{d}_2$, enquanto que na configuração 2, temos $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{d}_2 = (-1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}, 0)$.

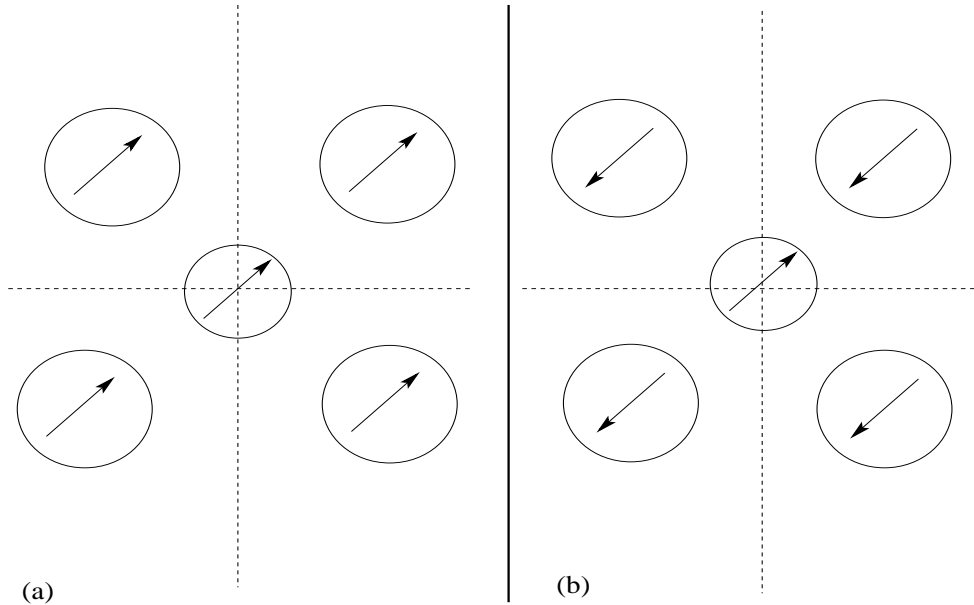


Figura 4.5: Representação gráfica das possibilidades de configurações iniciais para os momentos de dipolo das partículas 1 e 2. A figura (a) representa a configuração 1 e a figura (b) a configuração 2

Os momentos de dipolos das partículas 1 e 2 foram definidos desta forma para que se possa estudar tanto configurações atrativas quanto repulsivas, já que materiais magnéticos

com momentos de dipolo com sinais opostos tendem a se atrair enquanto com momentos de dipolos de mesmo sinal tendem a se repelir. No presente contexto de suspensões magnéticas, como consideram-se torques induzidos por interações magnéticas entre as esferas e a equação do momento angular de cada partícula é resolvida numericamente, esta tendência a atração ou repulsão não é determinística, já que ao longo do movimento as esferas podem estar livres para girar em torno de seus respectivos centros de massa, desorientando quaisquer configurações iniciais de dipolos pré-estabelecidas. A figura (4.6) ilustra uma simulação típica na qual pode-se observar tanto o movimento linear quanto angular das duas esferas ao longo do processo de sedimentação diferencial na presença de interações hidrodinâmicas e magnéticas para força e torque. É possível notar que nesta simulação típica a esfera 1 chega a possuir um desvio angular em relação a sua posição inicial de aproximadamente π radianos após interagir com a esfera 2. A dinâmica de agregação e dispersão hidrodinâmica devido à interações magnéticas em sistemas diluídos é um fenômeno fortemente não linear e depende na verdade de vários fatores como a posição inicial das esferas, a configuração inicial de seus momentos de dipolo, a intensidade dos parâmetros adimensionais como Ψ_m , St e St_R e é fortemente dependente do movimento translacional e rotacional das partículas, conforme será mostrado em detalhes mais para a frente.

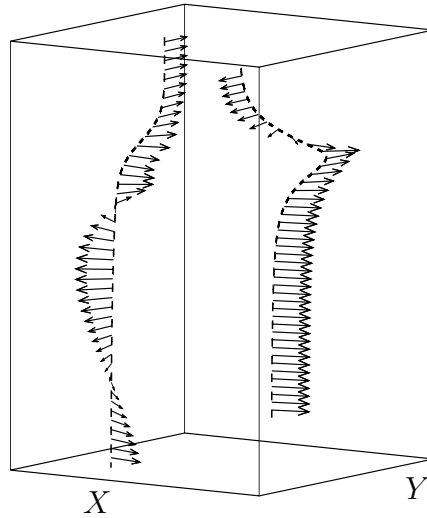


Figura 4.6: Simulação típica da sedimentação de duas partículas considerando a configuração 1, $St_R = 0.1$ e $\Psi_m = 100$. A posição inicial da partícula 1 foi definida como $X_1^{-\infty} = 1$, $Y_1^{-\infty} = 1$ e $Z_1^{-\infty} = -50$

O primeiro resultado de trajetórias relativas típicas apresentado é ilustrado nas figuras (4.7.a) e (4.7.b)

Diversos estudos, como Batchelor e Green (1972), Breedveld e Levine (2003) e Cunha e Hinch (1996), mostram que duas partículas esféricas rígidas, livres de inércia, não polarizadas ($\Psi_m = 0$), sem efeitos de rugosidade superficial submetidas a um processo de sedimentação em

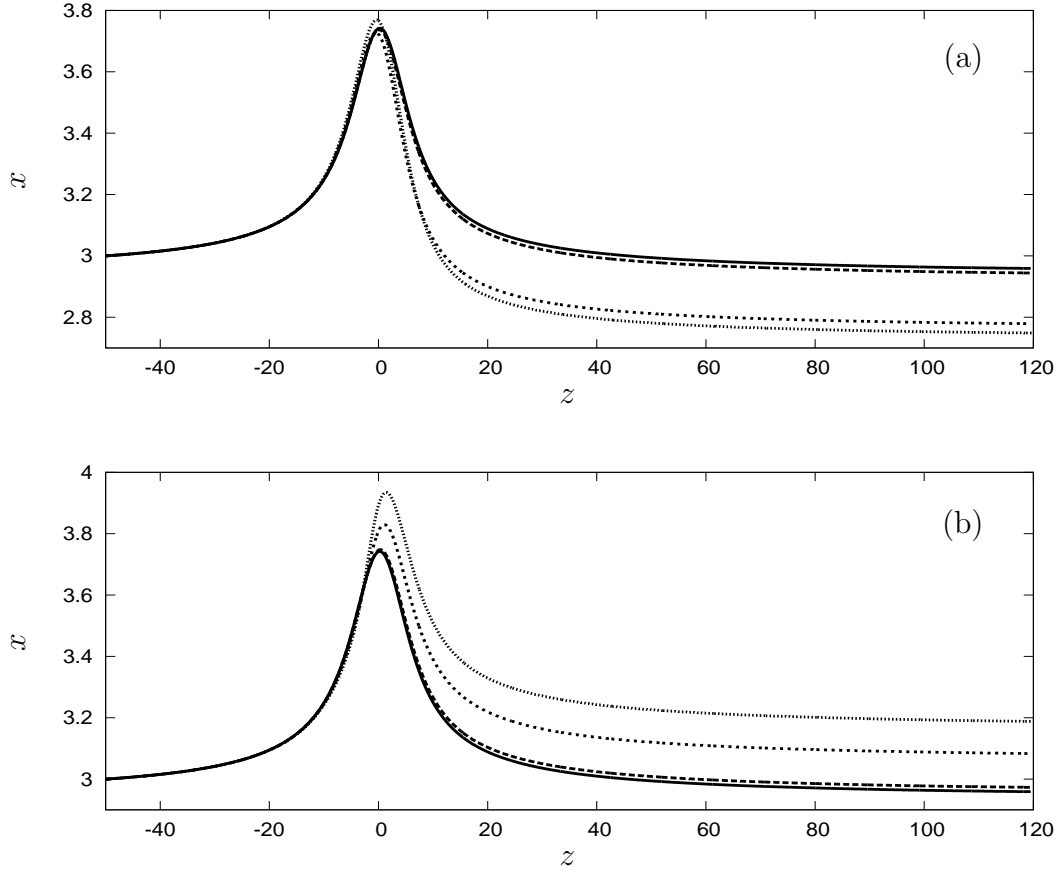


Figura 4.7: Trajetórias relativas para $St_R = St = 0.1$ para diferentes valores de Ψ_m : 0 (linha cheia grossa), 10 (linha tracejada longa), 100 (linha tracejada curta) e 200 (linha pontilhada). A figura (a) mostra resultados para configuração 1 e a figura (b) para a configuração 2. A posição inicial da partícula 1 foi $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -50$

baixo número de Reynolds, estão sujeitas ao princípio da reversibilidade cinemática e possuem trajetórias relativas reversíveis, como consequência direta da linearidade das equações de Stokes. Este mesmo princípio se aplica a duas partículas nas mesmas condições, livres da ação líquida da gravidade (*neutrally buoyant*), submetidas a um cisalhamento simples. Nas figuras (4.7.a) e (4.7.b) observa-se que mesmo para o caso no qual não existe interação magnética entre as esferas, ou seja no caso em que $\Psi_m = 0$, as trajetórias relativas das partículas apresentam um ligeiro desvio, em torno de 1% em relação à trajetória relativa totalmente reversível. Isto acontece porque considera-se nesse caso partículas com um pequeno efeito de inércia ($St = St_R = 0.1$), isto leva a um pequeno atraso na resposta das partículas às forças reversíveis produzidas por efeitos de lubrificação viscosa. Este pequeno atraso no tempo de resposta pode ser interpretado como um tempo de relaxação da partícula adimensionalizado por uma escala de tempo de difusão viscosa de quantidade de movimento, que é a própria definição do número de Stokes, que neste caso é pequeno, mas não nulo. Risbud et al. (2013) em um estudo recente mostraram e exploraram em detalhes essa quebra de reversibilidade

devido à inércia da partícula, neste caso os autores não estavam interessados na quebra de reversibilidade devido ao efeito de interação magnética, como no presente trabalho.

É possível notar para ambas as configurações iniciais de momento de dipolo uma quebra na reversibilidade das trajetórias relativas devido ao efeito de interação magnética entre as esferas. Quando isto ocorre dizemos que as trajetórias relativas são irreversíveis. Estas trajetórias relativas irreversíveis podem ser tanto agregativas quanto difusivas, esta diferenciação e um estudo completo sobre os principais parâmetros que levam a este tipo de trajetórias serão detalhados mais a frente. Esta quebra de reversibilidade cinemática de trajetórias relativas devido a efeitos de interação magnética foi explorada para o caso de esferas livres de torque, por Cunha e Couto (2008).

Nota-se que para a configuração 1 o aumento na intensidade do parâmetro de interação magnética Ψ_m leva a uma quebra mais intensa de reversibilidade. Além disso, para esta configuração, a separação final entre as esferas no eixo x diminui. Observa-se também que no momento do encontro, ou seja, em $z = 0$, a separação relativa entre as esferas para o caso no qual existe interação magnética é muito próxima da observada para o caso no qual a única força de interação consiste em lubrificação hidrodinâmica, porém os picos de separação máxima aparentam estar ligeiramente transladados no eixo z em relação ao caso reversível. Esta aproximação final entre as esferas no eixo x é característica de uma tendência atrativa entre as partículas devido ao efeito de interação magnética, ainda que neste caso específico não tenha ocorrido agregação, já que as trajetórias irreversíveis são abertas, ou seja, após o encontro as partículas terminam seus movimentos afastadas umas das outras. Este tipo de trajetória aberta irreversível será chamada de *trajetória difusiva*, enquanto que as trajetórias irreversíveis “fechadas” serão chamadas de agregativas. A figura (4.8) ilustra a diferença entre trajetórias difusivas e trajetórias agregativas.

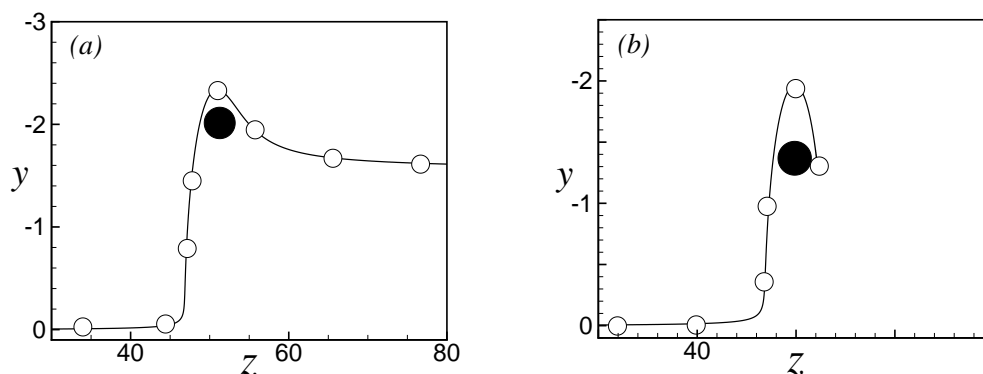


Figura 4.8: Trajetórias relativas difusivas (a) e agregativas (b)

A configuração 2 mostrada na figura (4.7.b) mostra uma variação mais intensa na separação máxima entre as esferas no eixo x no momento do encontro, além de um distancia-

mento maior entre as esferas no mesmo eixo após o encontro, sugerindo que esta configuração é mais repulsiva do que a configuração 1. É importante notar que o efeito das interações magnéticas altera os picos de separação máxima no encontro das esferas e em ambas as configurações translada este pico introduzindo um efeito assimétrico nas trajetórias relativas.

Com relação à predição do comportamento agregativo do sistema é importante notar que fisicamente uma trajetória será agregativa ou difusiva de acordo com a intensidade do parâmetros Ψ_m e com a orientação dos momentos de dipolo das esferas no momento do encontro. Como esta orientação varia com o tempo de acordo com o torque magnético que uma esfera induz na outra ao longo do movimento e depende do tempo no qual uma esfera responderá a este distúrbio de movimento rotacional, ou seja, do valor do número de Stokes rotacional St_R , não existe um padrão claro desta dinâmica no encontro. Para ilustrar isso, pode-se observar o comportamento do ângulo relativo entre as esferas para a configuração 2, observado na figura (4.9). O ângulo relativo entre as esferas é definido como $\theta_r = \arccos(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2)$. É possível notar uma grande variação do ângulo relativo nas proximidades do encontro. Além disso, nota-se que para valores de z próximos de zero, ou seja, no momento em que as esferas encontram-se mais próximas, este ângulo relativo se aproxima de zero sugerindo um maior alinhamento dos dipolos no momento do encontro. Este maior alinhamento sugere uma tendência mais repulsiva no momento do encontro, ainda que ligeiramente antes do encontro as esferas estivessem com seus dipolos desalinhados com uma intensidade pouco acima de $\pi/3$.

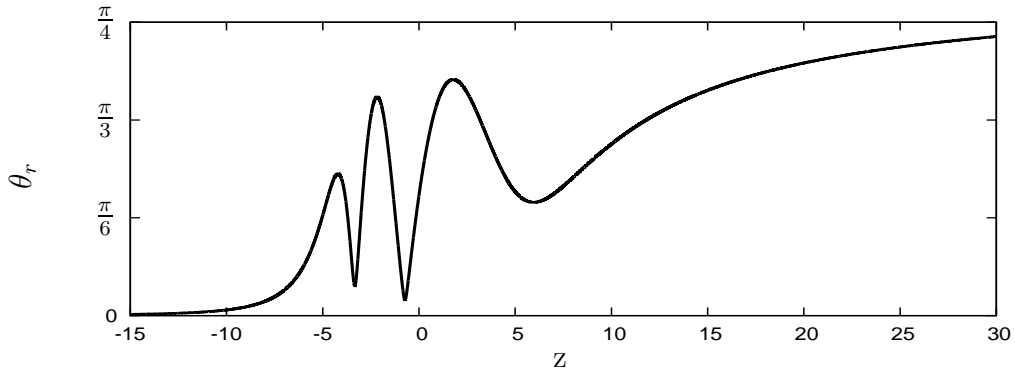


Figura 4.9: Ângulo relativo entre as esferas para configuração 1, com $St = St_R = 0.1$ e $\Psi_m = 100$. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$

Com o objetivo de compreender melhor esta dinâmica rotacional nas proximidades do encontro entre as partículas, foram construídos gráficos que ilustram a variação da velocidade angular relativa e do ângulo relativo entre as esferas com a separação relativa no eixo z para diferentes valores de St_R , Ψ_m e para as duas configurações definidas neste trabalho. Estes gráficos são representados nas figuras (4.10) e (4.11).

Pela figura (4.10) é possível observar que uma pequena intensidade de interação magnética entre as esferas $\Psi_m = 1$ produz uma ligeira variação de ângulo relativo entre ambas, neste caso, a velocidade angular relativa máxima foi da ordem de 10^{-2} para o caso de $St_R = 0.1$, esta baixa velocidade angular relativa leva a uma variação sutil no ângulo relativo entre as esferas, principalmente para o caso em que $St_R = 1$, pois além dos valores de ω alcançarem picos menores quando comparados ao caso em que $St_R = 0.1$, o tempo que as partículas demoram para a responder a estes distúrbios rotacionais é muito alto devido à alta inércia rotacional das partículas, isto faz com que para esta condição física o ângulo relativo entre as esferas permaneça praticamente constante.

Quando a intensidade do parâmetro Ψ_m aumenta de forma significativa esta dinâmica se torna muito mais interessante. É possível observar pelas figuras (4.10.c) e (4.10.d) que existe um pico no valor de ω pouco antes do encontro para a condição de $St_R = 0.1$, enquanto que para $St_R = 1$ este pico ocorre em torno de zero. Na verdade devido ao fato das partículas possuírem pouca inércia rotacional, qualquer distúrbio de torques produzidos por qualquer tipo de efeito físico, neste caso, interação magnética, induz rapidamente uma variação na velocidade angular das partículas. Como na condição de $St_R = 0.1$ as partículas respondem muito rapidamente a esse aumento de velocidade angular seus ângulos relativos variam rapidamente. Com esta variação de ângulos relativos os dipolos se alinham de maneira oposta ao alinhamento anterior o que leva a outro pico na velocidade angular relativa, que por sua vez induz outra grande variação no ângulo relativo. Esta dinâmica intrincada e não linear produz oscilações tanto na velocidade angular relativa quanto no ângulo relativo entre as esferas nas proximidades do encontro para condições de baixa inércia rotacional.

É possível notar ainda que a região na qual as velocidades angulares relativas permanecem perturbadas após o distúrbio é relativamente extensa, possuindo uma ordem de magnitude de aproximadamente $10a_1$. É possível que a combinação de interações hidrodinâmicas com decaimento lento (da ordem de $1/r$) com interações magnéticas com decaimento da ordem de $1/r^3$ para o torque, esteja atrasando o decaimento líquido da influência de uma esfera sobre a outra com relação à separação relativa entre as esferas. Comportamento semelhante é observado nos gráficos da figura (4.11), considerando agora outra configuração inicial de dipolos das partículas. A principal diferença para esta configuração é a maior quantidade de picos na velocidade angular relativa para a configuração de $\Psi_m = 100$ e $St_R = 0.1$.

Uma possível explicação para a maior quantidade e picos, indicando uma oscilação mais intensa na velocidade angular relativa entre as esferas nas proximidades do encontro para esta configuração de dipolo consiste no fato de que quando o ângulo relativo inicial é igual a zero, as trajetórias tendem a ser mais repulsivas, enquanto que quando o ângulo relativo inicial é π as trajetórias tendem a se comportar de maneira mais atrativa, conforme ilustram os gráficos

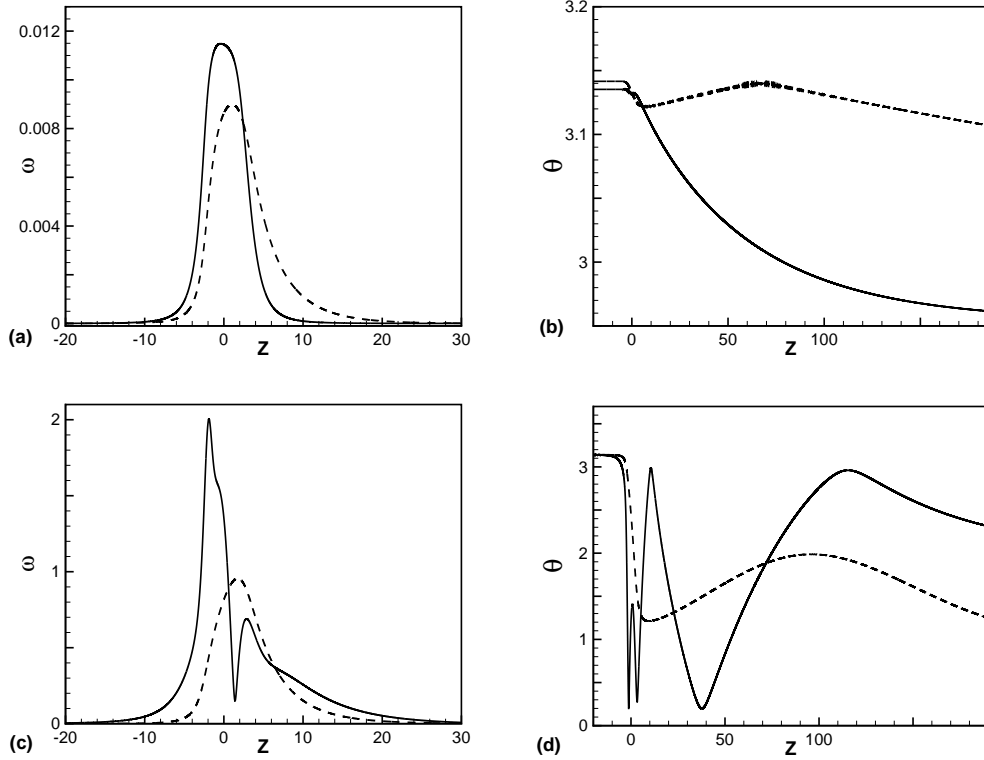


Figura 4.10: Velocidade relativa entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (a) e $\Psi_m = 100$ (c) e ângulo relativo entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (b) e $\Psi_m = 100$ (d), considerando a configuração 1. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$. A linha contínua representa $St_R = 0.1$ e linha tracejada $St_R = 1$.

da figura (4.7). Na configuração 2, as partículas começam com um ângulo inicial relativo igual a zero. Conforme as esferas vão sedimentando e se aproximando uma da outra devido ao efeito de sedimentação diferencial, uma esfera induz um alto torque por interação magnética na outra, o que leva a uma variação na velocidade angular de ambas e numa consequente variação do ângulo relativo entre as esferas. Este ângulo relativo, que inicialmente é zero, começa a aumentar, se aproximando de π , o que caracteriza uma tendência mais atrativa, com isso as esferas tendem a se aproximar e o torque por interação magnética começa a variar novamente na direção de induzir um movimento repulsivo, este movimento repulsivo leva a uma separação entre as esferas maior no plano xy , porém, devido ao movimento de sedimentação diferencial na direção do eixo z , as esferas tendem a se aproximar novamente neste eixo, isto induz uma outra variação no torque e consequente na velocidade angular entre as esferas, que induz uma nova mudança de alinhamento de dipolos. Esta dinâmica persiste até que as esferas estejam suficientemente longe uma da outra de modo que estes distúrbios são atenuados. Esta dinâmica oscilatória não é observada no caso de partículas com alta inércia rotacional, já que as escalas de tempo necessárias para que os distúrbios gerados por efeitos de interação magnética não são da mesma ordem de magnitude da escala de tempo

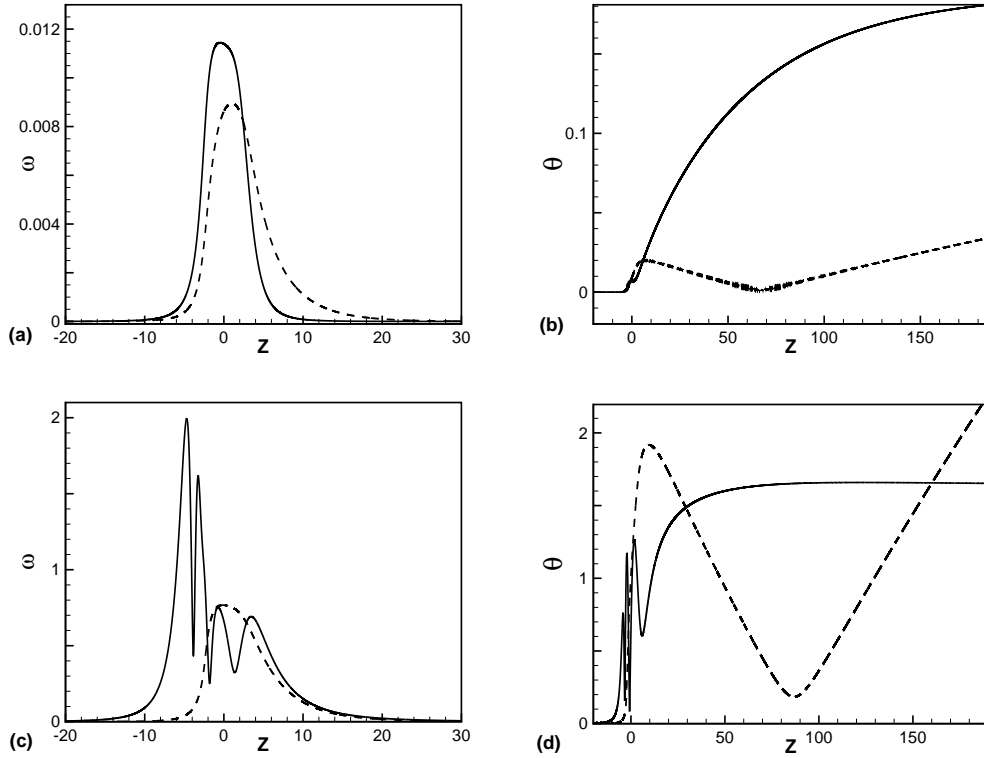


Figura 4.11: Velocidade relativa entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (a) e $\Psi_m = 100$ (c) e ângulo relativo entre as esferas para $\Psi_m = 1$ (b) e $\Psi_m = 100$ (d), considerando a configuração 2. A posição inicial da partícula 1 vale $X_1^{-\infty} = Y_1^{-\infty} = 3$ e $Z_1^{-\infty} = -15$. A linha contínua representa $St_R = 0.1$ e linha tracejada $St_R = 1$.

da resposta das partículas a distúrbios em seu movimento de rotação.

4.3 Diagramas de reversibilidade - análise de diferentes posições iniciais

A análise de trajetórias relativas realizada na seção anterior mostra como os efeitos de interações magnéticas são capazes de quebrar a reversibilidade do movimento relativo de sistemas de duas partículas se movimentando em baixos números de Reynolds. Esta análise serve como uma primeira abordagem na estimativa do comportamento difusivo ou agregativo em suspensões magnéticas diluídas nas quais as interações entre pares de partículas dominam. Porém, em um contexto de uma suspensão diluída com várias partículas, além dos parâmetros físicos dominantes da dinâmica, nesse caso o parâmetro de interação magnética Ψ_m e o número de Stokes rotacional St_R , a condição inicial do sistema (posição inicial e dipolo) contribui de forma significativa na dinâmica que se desenvolverá após o encontro. Por se tratar de um problema altamente não linear, é importante avaliar o efeito da condição inicial na resposta

do problema em conjunto com os parâmetros físicos que dominam a física do encontro e da interação entre partículas.

Uma maneira interessante de se avaliar a influência da condição inicial na quebra da reversibilidade hidrodinâmica por efeitos diversos, como por exemplo a interação magnética entre as duas esferas, consiste na determinação de gráficos semelhantes às seções de Poincaré, que neste contexto serão chamadas de diagramas de reversibilidade. Estes diagramas tem como objetivo determinar o efeito de quebra de trajetórias reversíveis considerando todas as possíveis trajetórias relativas entre as duas esferas, a partir de várias simulações considerando diversas condições iniciais.

A metodologia para a determinação dos diagramas de reversibilidade consiste na realização de diversas simulações, alterando-se a posição no plano xy da esfera que se encontra em uma posição mais alta no eixo z , ou seja, da esfera 1. Após a interação entre as partículas induzida pela sedimentação diferencial e da consequente estabilização do valor final da posição da esfera 1 no plano xy o valor da coordenada neste plano da esfera é marcado como um ponto no diagrama de reversibilidade.

A topologia deste diagrama fornece uma visão clara de como diversos parâmetros como a rugosidade superficial, interações por forças atrativas de Van der Waals, interações magnéticas, inércia de partícula, entre outros, são capazes de quebrar a reversibilidade do movimento. Na confecção dos diagramas de reversibilidade ilustrados nas figuras (4.13), (4.14), (4.15) e (4.16) foi utilizada uma grade $[10a_1 \times 10a_1]$, em que a_1 denota o raio da partícula 1. Desta forma foram considerados quatro quadrantes compostos por grades de dimensões $[5a_1 \times 5a_1]$ totalizando uma área total de encontros no plano xy de $100a_1^2$. A ideia de se considerar os quatro quadrantes na análise de todas as trajetórias relativas possíveis é importante, pois até o momento não podemos assumir que existe uma simetria no movimento relativo das partículas em todos os quadrantes. Um dos objetivos da presente análise consiste inclusive em estudar efeitos de anisotropia em processos difusivos induzidos por efeitos de interações magnéticas, mesmo na ausência de campo externo. A análise dessa anisotropia de coeficientes de difusão só pode ser feita considerando os quatro quadrantes do movimento. É importante falar que esta análise de trajetórias relativas através dos diagramas de reversibilidade considerando todos os quadrantes não havia sido feita em trabalhos anteriores como Couto e Cunha (2008).

Apenas para que a ideia da ferramenta chamada nesse trabalho de *diagrama de reversibilidade* fique mais clara, a figura (4.12) ilustra a diferença entre interações reversíveis e irreversíveis entre as partículas. Cada quadrante desse diagrama é construído a partir de 900 realizações diferentes, na qual se altera a posição da partícula que inicia o processo de

sedimentação em uma altura maior. Após o encontro (interação) a posição dessa partícula é marcada no plano perpendicular ao eixo paralelo à direção da gravidade. A figura (4.12.a) representa as diferentes posições iniciais da partícula 1. Como em um processo reversível as posições iniciais são iguais às posições finais, essa mesma figura também simboliza o mapa de posições finais. Já a figura (4.12.b) representa as posições finais após o encontro em um processo com interações magnéticas capazes de quebrar a reversibilidade do movimento das esferas.

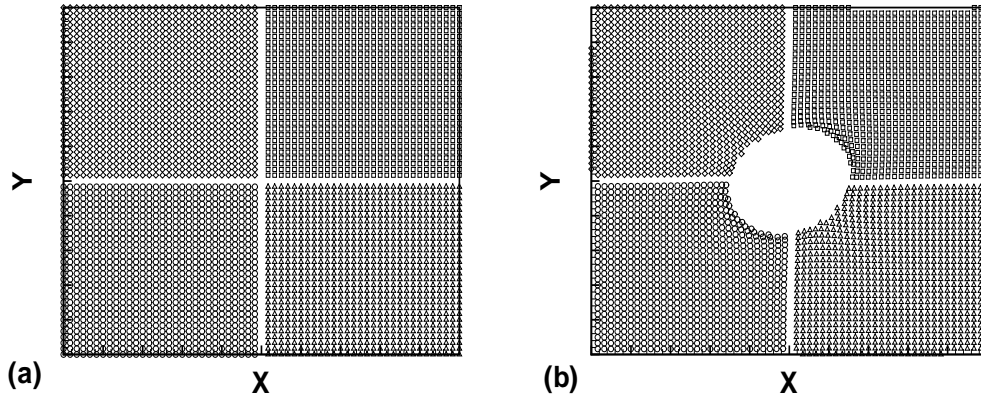


Figura 4.12: Diagramas de reversibilidade para trajetórias reversíveis (a) e irreversíveis (b).

4.3.1 Efeito da configuração inicial de dipolos

A figura (4.13) ilustra os diagramas de reversibilidade obtidos para diferentes valores de Ψ_m para um valor de $St_R = 0.1$ considerando as configurações iniciais de momentos de dipolo 1 e 2. Note que caso não houvesse nenhum efeito de interação magnética entre as partículas, o diagrama de reversibilidade consistiria numa malha com distribuição uniforme de pontos. É possível notar uma forte quebra de reversibilidade no movimento relativo das partículas devido ao efeito de interação magnética. As regiões vazias no centro dos quadrantes denotam a região de partículas que terminaram seus movimentos no plano xy em posições consideravelmente diferentes de suas posições iniciais no mesmo plano, enquanto que os pontos mais afastados do centro do diagrama e próximos às bordas da grade consistem em partículas que devido à configuração inicial tiveram apenas um pequeno desvio em relação à sua posição inicial no plano xy. Neste caso a referência é sempre a esfera 1, já que a esfera 2 possui sempre a mesma posição inicial, definida como sendo na origem do sistema de coordenadas.

Pela figura (4.13) é possível notar que independente da configuração inicial dos momentos de dipolo das partículas, a área da região vazia central do diagrama aumenta com o aumento

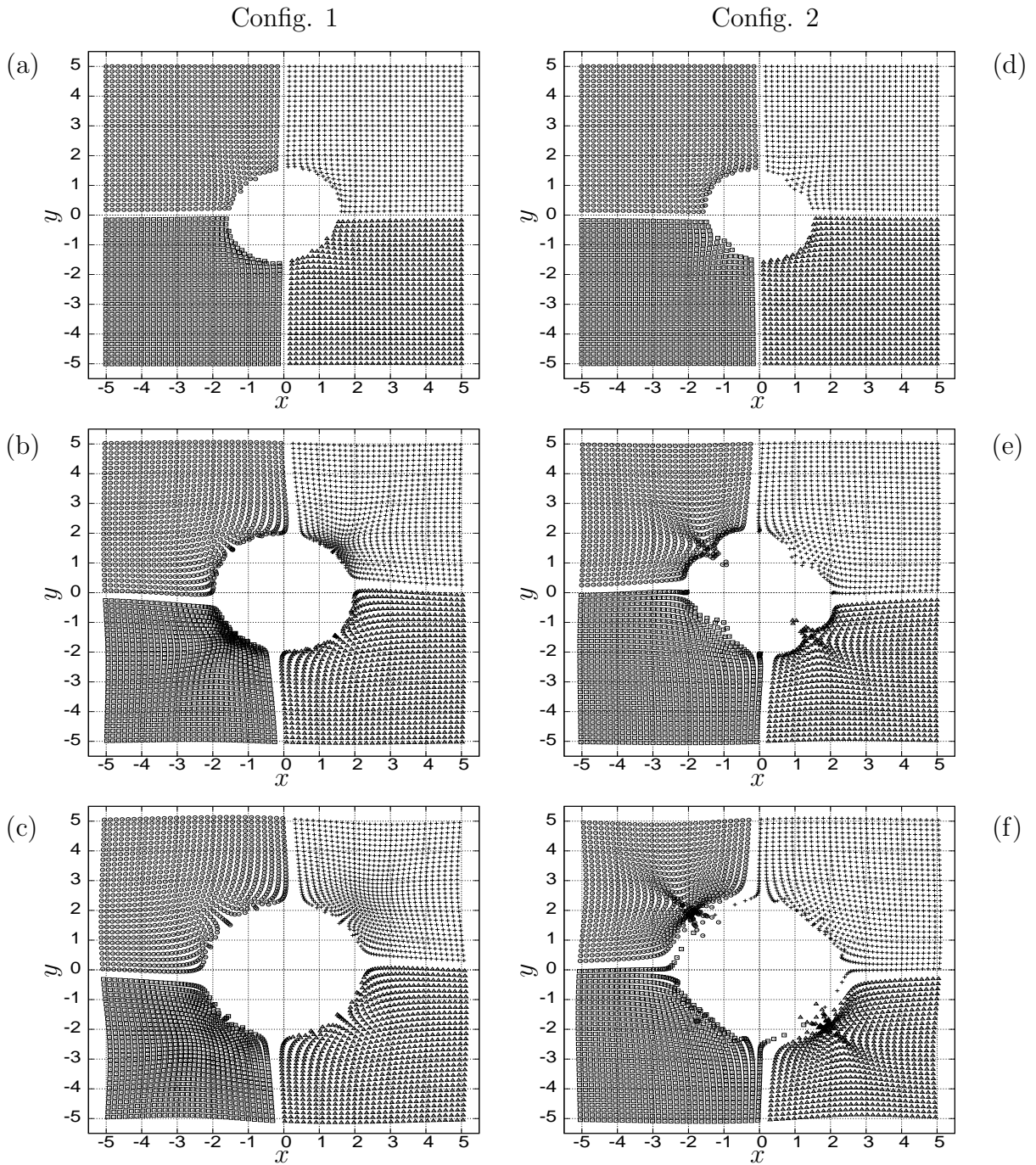


Figura 4.13: Diagramas de reversibilidade para $St_R = 0.1$, configuração 1 na coluna da esquerda e configuração 2 na coluna da direita: (a) $\Psi_m = 10$, (b) $\Psi_m = 100$, (c) $\Psi_m = 200$, (d) $\Psi_m = 10$, (e) $\Psi_m = 100$, (f) $\Psi_m = 200$

da intensidade do parâmetro de interação magnética. Este comportamento indica que o número de trajetórias irreversíveis aumenta com o aumento deste parâmetro. Além disso nota-se uma forte sensibilidade com relação à geometria ou forma destes diagramas em função da configuração inicial dos dipolos das esferas. É possível observar também que em alguns casos existe migração de partículas de um quadrante para outro. Este fato indica que estas interações magnéticas levam a um *mixing* na suspensão. É importante falar que não está

se considerando o efeito de um campo externo aplicado, que neste caso tenderia a orientar os dipolos das partículas em uma mesma direção e formar longas cadeias, como se observa experimentalmente. O objetivo desta análise é estudar quais são os parâmetros físicos que levam a agregação ou difusão para sistemas de suspensões magnéticas diluídas e como a condição inicial do problema influencia esta dinâmica.

É possível observar na figura (4.13) que todas as formas das regiões centrais vazias dos diagramas se aproximam mais de uma elipse do que de um círculo, que seria a geometria mais isotrópica possível no plano bidimensional. Este grau de anisotropia pode estar associado com mecanismos não lineares de migração e agregação de partículas produzidos por flutuações na orientação das partículas induzidas por torques magnéticos. Considerando uma elipse de semi-eixos L e B podemos medir e caracterizar um parâmetro de deformação D e um parâmetro de anisotropia I , definidos por

$$D = \frac{L - B}{L + B} \quad \text{e} \quad I = \frac{L}{B}. \quad (4.70)$$

Para a configuração 1, as taxas de deformação D e de anisotropia I , permanecem praticamente invariantes em torno de $D \approx 0.05$ e $I \approx 1.1$. Isto ocorre porque para esta configuração, no regime de baixos números de Stokes rotacional, todas as trajetórias são difusivas (não foi computada nenhuma trajetória agregativa para este caso), conforme será visto em seções seguintes. Esta alta taxa de trajetórias difusivas acaba por distribuir de forma mais simétrica a posição final da esfera 1 no plano xy . Este *espalhamento* das posições finais da esfera 1 acaba por relaxar o quadrante compressional do diagrama de reversibilidade para a configuração 1. Já para a configuração 2, foi observado uma taxa máxima de anisotropia em torno de $I \approx 1.3$ e variações de D de até 45% entre as formas das figuras (4.13.d) e (4.13.f).

4.3.2 Efeito da inércia rotacional

Conforme pode ser observado nas figuras (4.10) e (4.11) a inércia rotacional das partículas, controlada neste contexto pelo valor do número de Stokes rotacional, possui grande influência na orientação relativa dos dipolos das esferas 1 e 2 ao longo do movimento de sedimentação. Sabe-se que a formação de um dímero em um processo agregativo induzido por interações magnéticas depende fortemente da orientação dos momentos de dipolo das esferas no momento do encontro.

Desta forma a fim de realizar uma análise da influência da inércia rotacional em todas as possíveis configurações iniciais de posições das partículas 1 e 2, foram plotados os diagramas de

reversibilidade para uma alta intensidade do parâmetro magnético, $\Psi_m = 200$, considerando as duas configurações de momentos de dipolo iniciais no caso em que $St_R = 1$ e no caso em que as partículas possuem inércia rotacional tendendo a infinito.

No caso de $St_r \rightarrow \infty$, as partículas possuem tempo de relaxação infinito, o que representa um limite assintótico no qual as esferas encontram-se livres de torque, pois qualquer distúrbio eventual produzido no movimento rotacional da partícula demora um tempo muito maior para ser sentido do que o tempo que uma partícula demoraria para sentir os efeitos amortecedores de difusão de momento angular por forças de lubrificação viscosas, em outras palavras, a partícula não consegue responder aos torques aplicados com alterações em sua velocidade angular. É importante frisar que em trabalhos anteriores como Couto e Cunha (2008), a análise do movimento relativo das esferas foi realizada sem considerar o movimento rotacional das partículas. No presente trabalho pretende-se mostrar como isso afeta a precisão na determinação das taxas de agregação de suspensões magnéticas diluídas.

A figura (4.14) mostra uma grande área central vazia para as duas configurações quando comparada com o caso em que as partículas estão livres de torque, figura (4.15). Isto indica um maior número de trajetórias difusivas. É importante observar que existe uma densificação nas bordas da região central vazia do diagrama, isto indica que as interações magnéticas neste caso foram intensas o suficiente para distorcer a topologia do diagrama, mas não conseguem afastar as partículas mais do que uma certa distância no plano xy , que nesse caso chega a no máximo $2.8a_1$.

Contrastando com o que pode ser observado na figura (4.14), os diagramas de reversibilidade plotados para o limite assintótico livre de torque, mostram uma região central vazia menor, mas com menor densificação nas bordas desta mesma região, indicando uma menor taxa de difusão em detrimento de uma maior taxa de agregação. Na verdade para estes casos algumas trajetórias formaram dímeros irreversíveis ao longo do processo de sedimentação, estes pontos culminaram em valores de posições relativas no plano xy nulos que foram retirados do diagrama e contabilizados individualmente em cima de várias realizações para uma análise mais precisa das taxas de dispersão e agregação deste sistema. Em seções seguintes os gráficos referentes ao percentual de trajetórias agregativas e difusivas em cada caso são computados e interpretados.

A mensagem final mais importante desta análise preliminar do efeito da inércia rotacional das partículas é o fato de que caso o dipolo das partículas possa ser alterado de forma rápida ao longo do movimento de sedimentação das esferas, eventualmente uma trajetória que com dipolo fixo pudesse levar à formação de um dímero irreversível pode ser alterada de modo que no momento do encontro a interação magnética entre as esferas produza um efeito líquido de

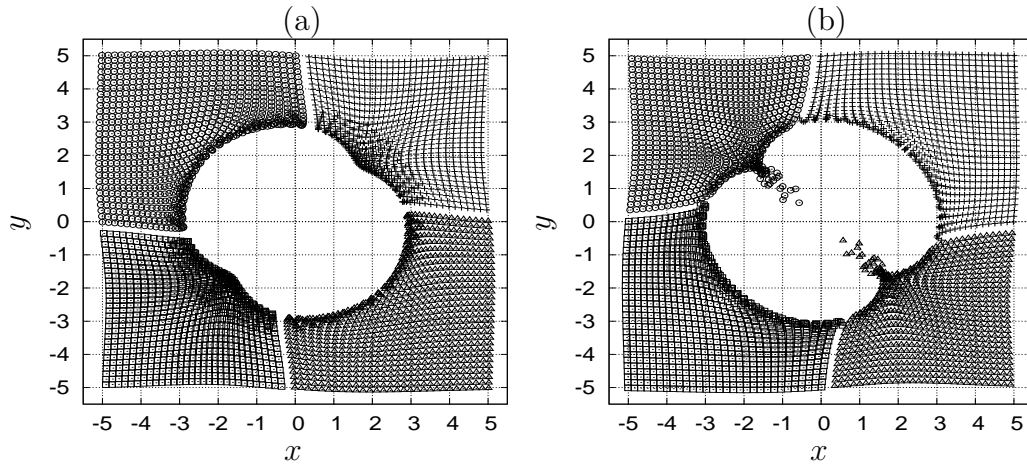


Figura 4.14: Diagramas de reversibilidade para as configurações 1 (a) e 2 (b). $St_R = 1.0$ e $\Psi_m = 200$

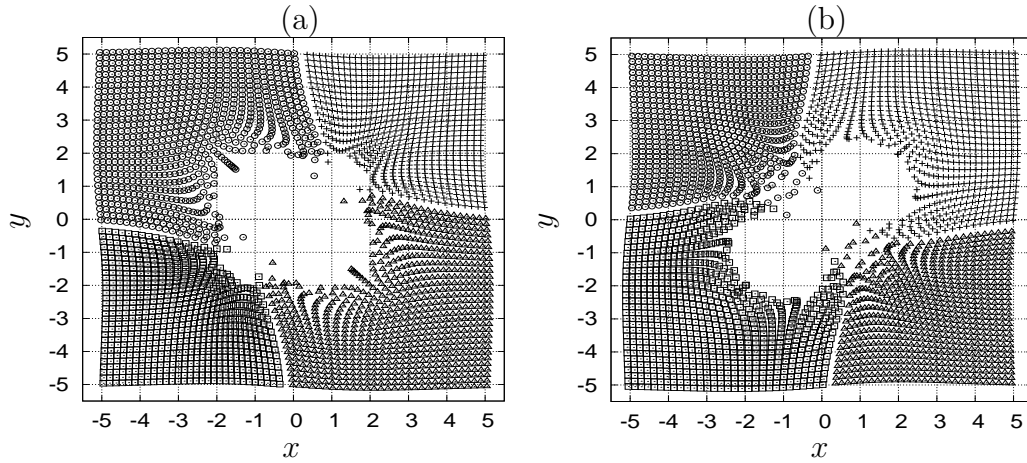


Figura 4.15: Diagramas de reversibilidade para as configurações 1 (a) e 2 (b). $St_R \rightarrow \infty$ e $\Psi_m = 200$

dispersão. Esta conclusão parcial é um indicativo de que a não consideração do movimento rotacional do sistema leva a uma superestimação das taxas de agregações nestas suspensões.

4.3.3 Bifurcações nos diagramas de reversibilidade

A fim de ilustrar as alterações na forma dos diagramas de reversibilidade com o aumento do parâmetro magnético Ψ_m foram plotados seis diagramas para a condição de $St_R \rightarrow \infty$ com a configuração de dipolos 2, para Ψ_m variando de zero (condição reversível) até 400. É possível observar uma grade regular totalmente reversível para o caso em que $\Psi_m = 0$, figura (4.16.a).

Para valores de Ψ_m acima de zero inicia-se uma interessante mudança na topologia desta

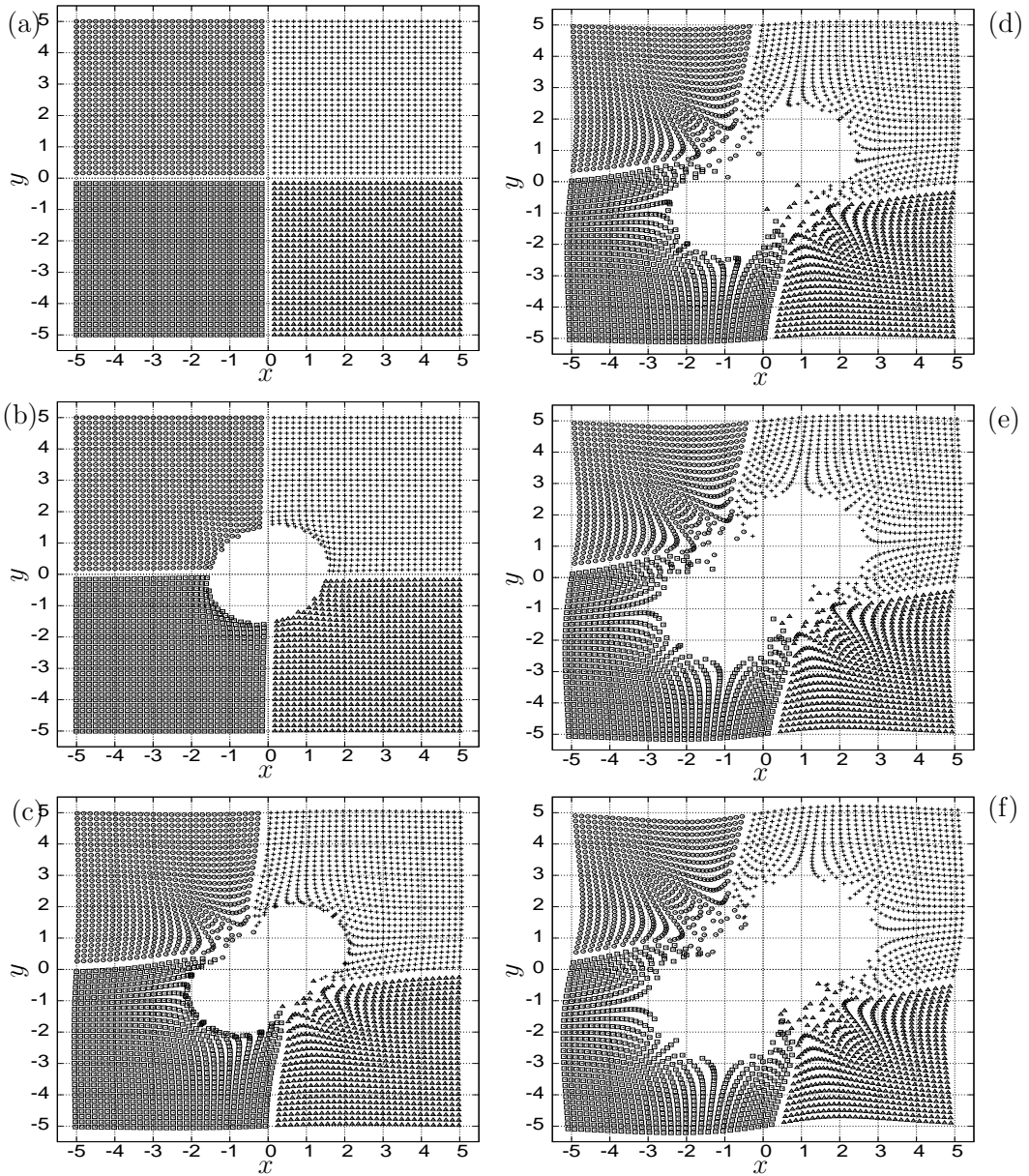


Figura 4.16: Diagramas de reversibilidade para a configuração 2 e $St_R \rightarrow \infty$. (a) $\Psi_m = 0$, (b) $\Psi_m = 10$, (c) $\Psi_m = 100$, (d) $\Psi_m = 200$, (e) $\Psi_m = 300$ e (f) $\Psi_m = 400$

grade. Para valores de $\Psi_m = 10$, figura (4.16.b), a região central vazia do diagrama se aproxima consideravelmente de uma esfera isotrópica indeformada com $D \approx 0.07$ e $I \approx 1.1$. Já na figura (4.16.d) a taxa de anisotropia é cerca de três vezes maior enquanto que $D \approx 0.5$, o que equivale a uma deformação do formato isotrópico do círculo de aproximadamente 7 vezes quando comparado com a pequena deformação apresentada na figura (4.16.b). Além da alteração nos valores dos parâmetros associados à deformação e anisotropia da região vazia do diagrama, é possível notar uma alteração significativa na forma destes diagramas que vão desde uma elipse (4.16.b), passando por uma geometria que se assemelha a um “halter” (*dumbell*), figura (4.16.c), evoluindo para um (*dumbell*) distorcido (4.16.d) até chegar em um padrão mais complexo lembrando um *atrator estranho*.

Além de significativas alterações na forma dos padrões dos diagramas de reversibilidade é possível observar uma forte anisotropia do comportamento difusivo entre os quadrantes. Isto indica que o mecanismo físico de dispersão em sistemas particulados diluídos devido a interações magnéticas possui caráter anisotrópico, bem diferente do observado devido à difusão isotrópica Browniana. Em seções seguintes serão explorados os efeitos da rotação das partículas na frequência de trajetórias agregativas e difusivas, bem como a influência do parâmetro magnético no aumento da taxa de anisotropia dos deslocamentos no plano xy .

4.4 Frequência de trajetórias agregativas e difusivas

Para avaliar a influência da rotação da partícula na taxa de agregação ou dispersão de uma suspensão magnética diluída foram definidas três condições no que diz respeito à intensidade deste efeito de inércia rotacional. No primeiro caso considerou-se um limite em que $St_R = 0.1 \ll 1$, no caso seguinte $St_R = 3.5$ e no terceiro caso o limite assintótico em que $St_R \rightarrow \infty$. Para cada um destes casos foram avaliadas seis condições de intensidade de interação magnética Ψ_m indo de 100 a 600. Considerou-se em todos os testes apenas a configuração de dipolos 1. Para cada caso estudado foram realizadas 900 simulações para diferentes posições iniciais da partícula 1 e foram contabilizados os percentuais de trajetórias agregativas e difusivas em cada condição física. Os resultados desta análise estão apresentados nas figuras (4.17.a) e (4.17.b).

É possível observar que quando se resolve o problema sem considerar a existência de torques devido à interações magnéticas esta configuração inicial de dipolos leva a um processo agregativo. Na verdade quando se resolve o problema sem considerar a existência de torques por interação magnética os momentos de dipolo das partículas permanecem fixos ao longo de todo o processo evolutivo e quando as esferas encontram-se suficientemente próximas esta interação entre os momentos de dipolo magnéticos leva à formação de um dímero, este comportamento é observado na figuras (4.17.a) e (4.17.b). É possível observar também que a solução da equação do momento angular no caso em que as partículas respondem praticamente de forma instantânea aos distúrbios em suas velocidades angulares induzidos por torques magnéticos fornece um caráter dinâmico à evolução das orientações dos momentos de dipolo magnéticos das partículas, de modo que o resultado final é um processo com quebra de reversibilidade, mas sem agregação, já que ao longo do processo evolutivo os momentos de dipolo magnético estão mais livres para girar. Dessa forma quando as partículas encontram-se próximas do contato esta orientação já não leva mais à formação de um dímero, como acontece quando presume-se que estes momentos de dipolo são estáticos.

É interessante notar que no limite assintótico em que as partículas estão livres de torque

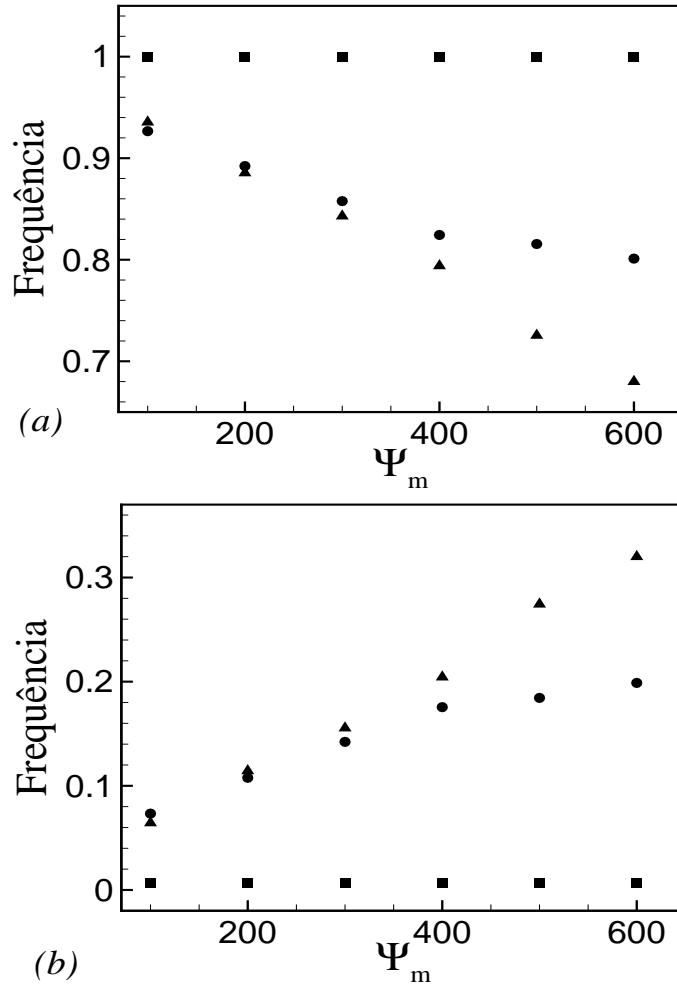


Figura 4.17: Frequência de trajetórias difusivas (a) e agregativas (b). Configuração de dipolos 1. $St_R = 0.1$ (quadrados), $St_R = 3.5$ (círculos) e $St_R \rightarrow \infty$ (triângulos)

($St_R \rightarrow \infty$) a dependência funcional entre as frequências de trajetórias agregativas e difusivas parece ser linear em função do parâmetro Ψ_m . Além disso para intensidades deste parâmetro $\Psi_m < 200$ não se observa diferença perceptível entre a frequência de trajetórias agregativas e difusivas entre o caso de inércia rotacional finita ordem 1 ($St_R = 3.5$) e o limite assintótico $St_R \rightarrow \infty$, aparentemente intensidades de torques magnéticos significativamente altas são requeridas para desorientar os dipolos de partículas com inércia rotacional moderada produzindo um desvio entre o comportamento destas frequências entre $St_R = 3.5$ e $St_R \rightarrow \infty$ para $\Psi_m \geq 300$. Este desvio entre o comportamento para $St_R = 3.5$ e $St_R \rightarrow \infty$ chega a produzir por exemplo uma diferença de cerca de 15% no número de trajetórias difusivas contabilizadas em cada caso para a condição em que $\Psi_m = 500$. Uma informação interessante é o fato de que uma extrapolação do comportamento ilustrado nas figuras (4.17.a) e (4.17.b) para o limite assintótico $St_R \rightarrow \infty$ indica que na condição em que $\Psi_m = 1900$ todas as trajetórias seriam agregativas, comportamento que jamais seria observado para partículas com baixa inércia

rotacional.

Estes resultados mostram a importância de se resolver a equação do balanço de torques para as partículas, pois a existência de torques por interação entre os momentos de dipolo magnético das partículas é um mecanismo físico, que gera grandes alterações na dinâmica de agregação e difusão destas suspensões magnéticas diluídas. A conclusão final desta análise é que a não consideração do movimento rotacional das partículas levará sempre a uma superestimativa na frequência de trajetórias agregativas em suspensões magnéticas diluídas. Em outras palavras, podemos dizer que o fato das partículas estarem livres para girar acaba por funcionar como um agente estabilizador de suspensões magnéticas evitando formação de agregados e conseqüente precipitação destes por sedimentação diferencial.

4.5 Anisotropia de deslocamentos de trajetórias difusivas

É possível observar pelas figuras (4.7.a) e (4.7.b) que em alguns casos pequenos desvios nos valores do gap mínimo entre as partículas geram grandes deslocamentos líquidos após o encontro. Para analisar esta relação podemos fazer uma simples análise de escala balanceando forças de lubrificação viscosas no momento do encontro com forças de interação magnética. No regime de baixos números de Reynolds, temos que

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \eta \frac{\partial^2 u}{\partial r^2}, \quad (4.71)$$

em que r denota a coordenada que conecta as linhas de centro das duas partículas. No momento do encontro podemos propor uma escala para $r \sim \delta_g$ em que δ_g representa o gap de lubrificação e uma escala $\langle X \rangle$ para a coordenada x representando o deslocamento médio no plano XY após o encontro, podemos ainda propor uma escala U_s , representando a velocidade de Stokes da esfera 1 como uma escala típica para a velocidade u no momento do encontro. Como pressão representa uma força normal compressional por unidade de área, o termo de gradiente de pressão no lado esquerdo da equação (4.71) representa uma força de lubrificação viscosa F_l por unidade de volume, desta forma temos a seguinte escala para as forças de lubrificação viscosas

$$F_l \sim \frac{\eta U_s \langle X^2 \rangle}{\delta_g}, \quad (4.72)$$

uma escala típica da força de interação magnética F_m entre as partículas no momento do encontro pode ser obtida a partir da equação (4.26), o que fornece uma escala para F_m igual a

$$F_m \sim \frac{\mu_0 m_d^2}{\delta_g^4}, \quad (4.73)$$

neste contexto m_d representa a intensidade de momento de dipolo médio das duas partículas, balanceando F_l e F_m temos

$$\langle X^2 \rangle^{1/2} \sim \frac{\mu_0 m_d^2}{\eta U_s} \delta_g^{-3/2}, \quad (4.74)$$

ou seja, temos que $\langle X^2 \rangle^{1/2} \sim \delta_g^{-3/2}$, este balanço indica por exemplo que um gap mínimo da ordem de $0.1a_1$ produziria um deslocamento líquido após o encontro no plano xy da ordem de 30 vezes o gap. Este padrão pode ser observado na figura (4.7), principalmente para a configuração 1 de momentos de dipolo.

Esta análise de escala não indica necessariamente que os deslocamentos líquidos na direção X são os mesmos na direção Y, pois como visto nos diagramas de reversibilidade apresentados na seção anterior, este processo difusivo possui caráter intrínseco anisotrópico. Para quantificar e ilustrar esta anisotropia dos deslocamentos médios quadráticos nos planos zx e zy, foram realizadas 900 simulações com diferentes condições iniciais das posições das esferas, levando em consideração apenas a configuração 1 de momentos de dipolo para $St_R = 0.1$ para diferentes parâmetros magnéticos. Após um tratamento estatístico em cima destas 900 realizações foram computadas as razões de anisotropia dos deslocamentos médios quadráticos dados por $\mathcal{A} = \langle \Delta X^2 \rangle / \langle \Delta Y^2 \rangle$ em função de Ψ_m . Este gráfico é ilustrado na figura (4.18).

O número de realizações para a computação desta taxa de anisotropia de deslocamentos médios quadráticos produz um erro máximo da ordem de 3%, como pode ser observado nas barras de erro da figura (4.18), ou seja, a estatística realizada é significativa dentro desta faixa de incerteza. É possível observar um comportamento linear entre esta taxa \mathcal{A} e o parâmetro Ψ_m e para valores de $\Psi_m \approx 500$ observa-se uma taxa de anisotropia da ordem de $\mathcal{A} \approx 1.5$. A linearidade apresentada no gráfico da figura (4.18) implica que $\langle \Delta X^2 \rangle = C \langle \Delta Y^2 \rangle \Psi_m$. Com C sendo dependente do valor de St_R , pois conforme visto anteriormente este parâmetro altera de forma significativa as taxas de agregação e difusão nestes tipos de suspensões. Como $\langle \Delta Y^2 \rangle$ também é uma função de Ψ_m , podemos propor que $\langle \Delta X^2 \rangle = \mathcal{F}(St_r, \Psi_m)$.

Como as difusividades devido ao efeito de interações magnéticas nas direções x e y, D_x e D_y , são fortemente dependentes de $\langle \Delta X^2 \rangle$ e $\langle \Delta Y^2 \rangle$, diferentemente do caso de difusão isotrópica Browniana, e como visto nesta seção, também dependem fortemente da presença de uma segunda partícula, podemos propor em uma escala contínua um coeficiente de dispersão para uma suspensão diluída com fração volumétrica ϕ dado por

$$D = a_1 |U_S^{12}| \mathcal{F}(St_R, \Psi_m) \phi + O(\phi^2), \quad (4.75)$$

em que $|U_S^{12}|$ representa uma escala típica da velocidade relativa entre as partículas. Em seções seguintes serão exploradas algumas alternativas para a computação desta função \mathcal{F} com base em problemas de simulação de muitos corpos.

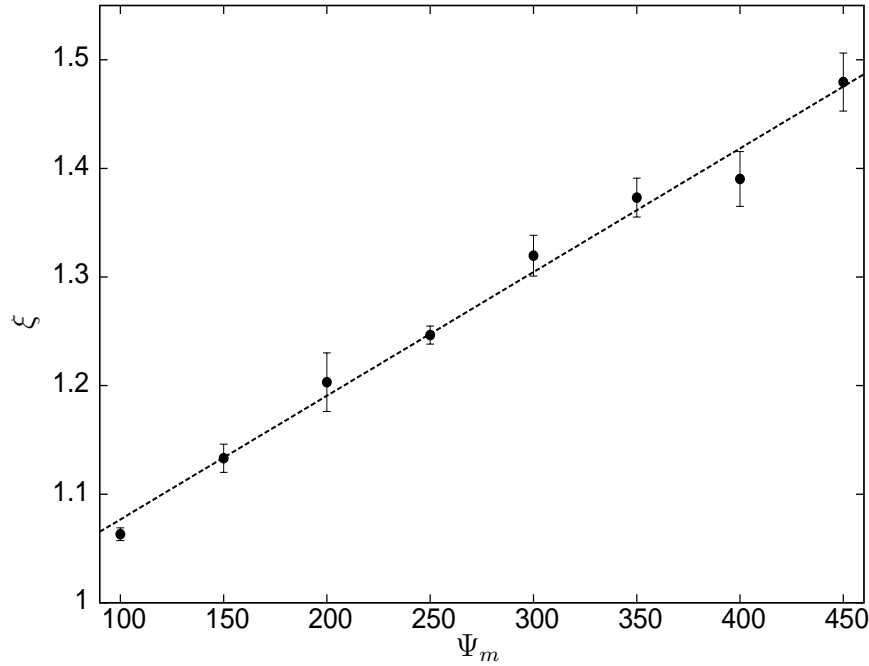


Figura 4.18: Taxa de anisotropia entre os deslocamentos líquidos no plano zx e zy para a configuração 1, com $St_R = 0.1$. A linha pontilhada representa um fit linear

4.6 Influência do movimento Browniano nas trajetórias relativas

Como visto na formulação do problema de duas partículas abordado neste capítulo, é possível controlar a intensidade do movimento Browniano ao qual as partículas estarão sujeitas no processo de sedimentação diferencial através do parâmetro adimensional denominado número de Péclet, desde que a condição fortemente Browniana, no qual $Pe \ll 1$ até um regime não Browniano no qual $Pe \rightarrow \infty$. Todos os resultados tratados nesta seção focam no processo de dispersão ou agregação induzidos por interações magnéticas em regimes não Brownianos e estariam mais inseridos em um contexto de suspensões magnéticas de micro-compósitos. No tratamento de suspensões coloidais magnéticas ou ferrofluidos é importante considerar o efeito do movimento Browniano, principalmente porque na prática ele é um dos maiores estabilizadores contra o processo de sedimentação diferencial e mantém a suspensão em constante estado de movimento em uma tentativa de randomizar a distribuição de partículas para uma condição mais homogênea.

O capítulo anterior mostrou como o número de Peclet altera a trajetória de uma partícula isolada sujeita ao empuxo líquido da gravidade para condições de partícula sem inércia e partícula com um pequeno efeito de inércia. A figura seguinte mostra as trajetórias típicas de uma partícula teste com $Pe \sim 1$ na condição de $St = St_r = 0.1$ e interações magnéticas com $\Psi_m = 200$. A comparação é feita para o problema de duas partículas com interações hidrodinâmicas apresentado nesta seção e para o problema de muitos corpos (que será apre-

sentado na seção seguinte) considerando 500 partículas nas mesmas condições de parâmetros físicos em dois regimes de frações volumétricas $\phi = 0.5\%$ (diluído) e $\phi = 15\%$. É importante falar que interações hidrodinâmicas não foram consideradas para o problema de muitos corpos neste contexto específico.

É possível observar que o efeito de interações magnéticas é pouco influente na trajetória de uma partícula teste independente da fração volumétrica de partículas na condição em que o movimento Browniano domina a dinâmica, figura (4.19). Para regimes de Péclet ordem 1 as flutuações induzidas pelo movimento aleatório das moléculas do líquido incidindo em cima das partículas geram deslocamentos líquidos na trajetória das partículas muito mais intensos que aquelas induzidas por interações magnéticas. Ainda assim é possível observar um maior deslocamento líquido da partícula no plano xy nos casos no qual o efeito das interações entre mais de duas partículas é considerado.

A figura (4.20) ilustra a trajetória de uma partícula teste para as mesmas condições, porém no caso em que $Pe \rightarrow \infty$. Observa-se neste caso uma forte influência do efeito de interações magnéticas no movimento de uma partícula teste imersa em uma suspensão magnética. Conforme aumenta-se a fração volumétrica de partículas o deslocamento transversal líquido no plano xy aumenta de modo considerável e a partícula segue uma trajetória altamente não linear induzida por interações com outras partículas da suspensão. Para o regime diluído no qual $\phi = 0.5\%$ o comportamento é muito semelhante ao problema de duas partículas no limite assintótico $\phi \rightarrow 0$.

É importante falar que o efeito de inércia de partícula, mesmo que pequeno, evita uma trajetória totalmente Browniana, mesmo no caso de baixos números de Péclet. Este efeito somado à gravidade na direção z faz com que o deslocamento líquido das partículas seja maior na direção z quando comparado com as direções x e y . Como o coeficiente de difusão Browniano está ligado aos deslocamentos médios quadráticos, temos uma quebra da isotropia deste coeficiente de difusão devido à inércia da partícula somada a existência do campo gravitacional numa direção preferencial.

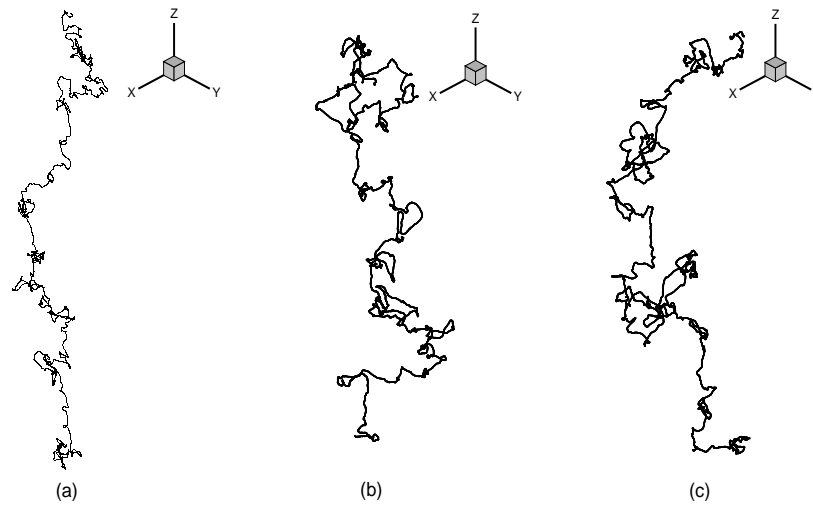


Figura 4.19: Trajetórias de uma partícula teste para $Pe \sim 1$, $\Psi_m = 200$ e $St = St_R = 0.1$. Problema de duas partículas (a) e problema de muitos corpos sem interações hidrodinâmicas com 500 partículas na suspensão para $\phi = 0.5\%$ (b) e $\phi = 15\%$ (c)

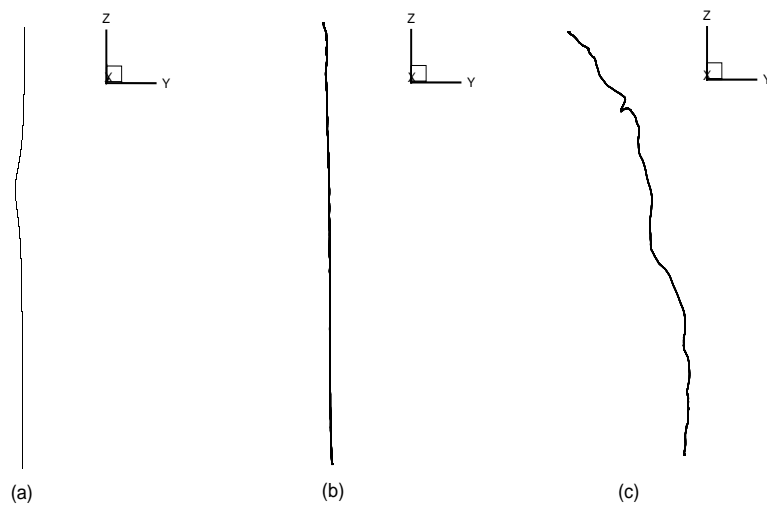


Figura 4.20: Trajetórias de uma partícula teste para $Pe \rightarrow \infty$, $\Psi_m = 200$ e $St = St_R = 0.1$. Problema de duas partículas (a) e problema de muitos corpos sem interações hidrodinâmicas com 500 partículas na suspensão para $\phi = 0.5\%$ (b) e $\phi = 15\%$ (c)

Capítulo 5 SISTEMAS COM MUITOS CORPOS - PARTE I

5.1 Formulação matemática para o problema de muitos corpos

A presente análise possui como objetivo determinar o movimento de uma suspensão de partículas esféricas que interagem magneticamente, sujeitas à forças gravitacionais, forças de arrasto viscosas e ao movimento browniano imposto pelas moléculas do líquido base. Durante o presente trabalho a análise da dinâmica de sistemas particulados com muitos corpos será dividida em duas partes. Neste capítulo (PARTE I) o problema será modelado sem interações hidrodinâmicas e com um pequeno efeito de inércia de partícula. No capítulo seguinte (PARTE II) as interações hidrodinâmicas de longo alcance serão acrescentadas à formulação e será trabalhado o problema de mobilidade (sem inércia de partícula). Neste capítulo a equação dimensional que rege o movimento de cada partícula da suspensão é dada por:

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -6\pi\eta a \mathbf{u} + \Delta\rho \mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_m + \mathbf{f}_r + \mathbf{f}_c \quad (5.1)$$

em que \mathbf{f}_m representa a força magnética que age sobre cada partícula devido à interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas e devido a um campo magnético externo aplicado sobre as mesmas, \mathbf{f}_c representa uma força repulsiva fictícia que age entre duas partículas próximas do contato e \mathbf{f}_r denota uma força de contato que age entre duas partículas que se chocam. A força por interação magnética é dada pela equação (5.2)

$$\mathbf{f}_m = \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}] + [\mu_0 m_i \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{H}], \quad (5.2)$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, m_i representa o módulo do vetor momento de dipolo da partícula i , \mathbf{d}_i representa o vetor unitário na direção do momento de dipolo da partícula i , $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ é o vetor unitário na direção da linha de centro que une as partículas i e j e \mathbf{H} é o vetor campo magnético externo aplicado à suspensão. A força repulsiva \mathbf{f}_r que age em partículas próximas é dada pela equação (5.3).

$$\mathbf{f}_r = \Lambda (6\pi\eta a) u_i e^{\left(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}}\right)} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (5.3)$$

na equação (5.3) Λ e \mathcal{Y} são constantes de calibração desta força fictícia, a é o raio da partícula, ϵ_{ij} é a distância entre as superfícies das partículas que se aproximam dada por $\epsilon_{ij} = r_{ij} - 2a$, ou em termos adimensionais por $\epsilon_{ij} = r - 2$, em que r_{ij} é a distância entre os centros das esferas dimensional e r corresponde ao mesmo parâmetro adimensionalizado pelo raio de

uma das esferas, a representa o raio de uma dada esfera i (todas as suspensões tratadas no presente trabalho são monodispersas), u_i é o módulo da velocidade da partícula i e $\hat{\mathbf{e}}_r$ é o vetor unitário que conecta a linha de centro das duas partículas. Este esquema de forças repulsivas foi proposto por Cunha (1995) e utilizado posteriormente por Nitsche e Batchelor (1997). Um esquema visual da força fictícia de repulsão que atua entre partículas próximas é mostrado na figura (5.1). As forças de contato entre partículas são dadas pela equação (5.4):

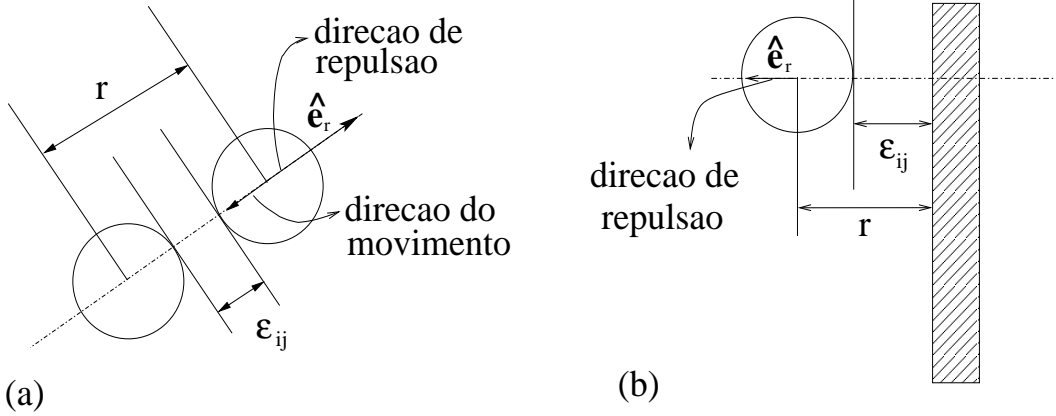


Figura 5.1: Forças de repulsão entre partículas (a) e entre partícula-parede (b)

$$\mathbf{f}_c = \Upsilon E b^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (5.4)$$

em que Υ é uma constante de calibração do modelo, E é uma propriedade do material que compõe as esferas dada pela expressão (5.5)

$$\frac{1}{E} = \frac{(1 - \nu_i)}{E_i} + \frac{(1 - \nu_j)}{E_j}, \quad (5.5)$$

em que E_i e ν_i representam o módulo de Young e o módulo de Poisson da esfera i respectivamente. O parâmetro b é dado pela equação (5.6)

$$b = \frac{a_i a_j}{a_i + a_j}, \quad (5.6)$$

para uma suspensão monodispersa de esferas de mesmo material, a força repulsiva que age entre as mesmas é dada pela expressão (5.7)

$$\mathbf{f}_c = \bar{C} E_i a^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (5.7)$$

com

$$\bar{C} = \frac{\Upsilon}{2^{3/2} (1 - \nu_i)}. \quad (5.8)$$

Um esquema visual da força de contato que atua entre partículas que se chocam é mostrado na figura (5.2). Para a equação do momento angular da partícula, temos:

$$J \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = -8\pi\eta a^3 \boldsymbol{\omega} + 8\pi\eta a^3 \left(\frac{6D_R}{\delta\tau} \right)^{1/2} \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{T}_m, \quad (5.9)$$

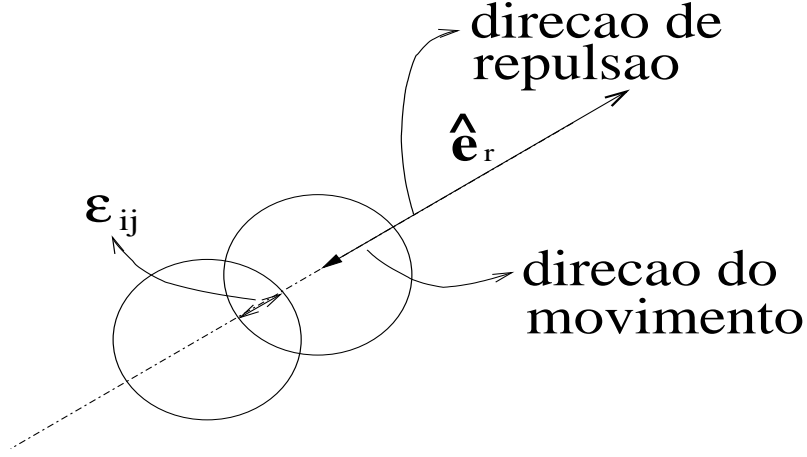


Figura 5.2: Forças de contato

em que J representa o momento de inércia da partícula, ω a velocidade angular, \mathcal{D}_R é o coeficiente de difusão browniano rotacional e \mathbf{T}_m é o torque magnético que age sobre cada partícula devido à interações entre os momentos de dipolo das partículas e à um campo externo aplicado, dado pela expressão (5.10)

$$\mathbf{T}_m = \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \sum_{i=1}^N \left[\mu_0 m_i H (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{h}}) \right], \quad (5.10)$$

em que H representa o módulo do campo magnético externo aplicado no local onde a partícula se encontra e $\hat{\mathbf{h}}$ é o vetor unitário que indica a direção do campo externo.

5.2 Adimensionalização das equações governantes

Para a adimensionalização das equações (5.1) e (5.10) foram utilizadas as seguintes escalas características:

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_s}, t^* = \frac{t U_s}{a}, \omega^* = \frac{\omega a}{U_s}, \quad (5.11)$$

desta forma as equações governantes adimensionais são dadas pelas equações (5.12) e (5.13).

$$St \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{u} + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe \delta \tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}_m^* + \mathbf{f}_r^* + \mathbf{f}_c^* \quad (5.12)$$

e

$$St_r \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = -\boldsymbol{\omega} + \left(\frac{6}{Pe_r \delta \tau} \right)^{1/2} \hat{\boldsymbol{\epsilon}} + \mathbf{T}_m^*, \quad (5.13)$$

nas equações (5.12) e (5.13) o asterisco superior foi suprimido para evitar densificação de nomenclatura e as variáveis já se encontram em sua forma adimensional. Os parâmetros St, Pe representam o número de Stokes e o número de Peclet da partícula e St_r e Pe_r o número de Stokes e de Peclet rotacionais, definidos de acordo com a equação (5.14)

$$St = \frac{m U_s}{6\pi\eta a^2}, Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}}, St_r = \frac{J U_s}{8\pi\eta a^4}, Pe_r = \frac{U_s}{\mathcal{D}_R a}. \quad (5.14)$$

As expressões adimensionais das forças magnética, de repulsão, de contato e do torque magnético são dadas pelas equações (5.15)-(5.18).

$$\mathbf{f}_m^* = \frac{\alpha^*}{Pe r_{ij}^4} \sum_{i \neq j} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] + \left[\frac{\alpha}{Pe} \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} \right], \quad (5.15)$$

$$\mathbf{f}_r^* = \Lambda^* |\mathbf{u}_i| e^{\left(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}}\right)} \hat{\mathbf{e}}_r \quad (5.16)$$

$$\mathbf{f}_c^* = P_c \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r \quad (5.17)$$

$$\mathbf{T}_m^* = \frac{3\alpha^*}{4Pe r_{ij}^3} \sum_{i \neq j} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \right] + \left[\frac{\alpha}{Pe r} (\mathbf{d}_i \times \hat{h}) \right], \quad (5.18)$$

em que α é uma parâmetro adimensional associado à estabilidade da suspensão e mede a relação entre forças magnéticas e brownianas, α^* é o parâmetro α multiplicado pela magnetização do material da partícula adimensional e P_c é um parâmetro adimensional associado à forças de contato . Todos esses parâmetros adimensionais são dados pela equação (5.19).

$$\alpha = \frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T}, \alpha^* = M_d^* \alpha, M_d^* = \frac{m_d}{v_p H_0}, P_c = \frac{\overline{C} E_i a^2}{6\pi \eta a U_s} \quad (5.19)$$

em que v_p denota o volume da partícula.

A adimensionalização utilizada busca manipular os termos adimensionais que surgem associados à interações magnéticas partícula-partícula e campo-partícula para que o parâmetro α utilizado na área de física de suspensões magnéticas apareça como parâmetro físico do problema.

Utilizando a adimensionalização adotada o parâmetro α surge juntamente com o número de Péclet. É importante notar que não necessariamente os parâmetros α e Pe estão acoplados. Para que isso fique mais claro, podemos representar o número de Péclet como uma relação entre energias associadas à forças de arrasto viscosas e flutuações térmicas da forma

$$Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}} = \frac{6\pi \eta a^2 U_s}{k_B T}, \quad (5.20)$$

desta forma podemos alterar o parâmetro α através da variação de um campo externo aplicado sem modificar o número de Péclet, de modo que a forma com a qual a relação α/Pe surge no processo de adimensionalização adotado é fisicamente consistente.

Para simulações Brownianas nas quais $Pe \neq 0$ e Pe também não tende à infinito, a forma de utilização dos parâmetros α e α^* através da presente manipulação algébrica dos parâmetros adimensionais que multiplicam termos de forças magnéticas, não apresenta nenhuma inconsistência física, semântica ou numérica. Entretanto no tratamento de suspensões não coloidais, nas quais $Pe \rightarrow \infty$, os termos α^*/Pe e α/Pe não podem ser determinados desta

forma. Nessas situações a combinação de parâmetros α^*/Pe e α/Pe é escrita como no problema de duas partículas através das variáveis ψ_m e φ_m e as forças e torques Brownianos são simplesmente desligadas numericamente. Este procedimento permite a avaliação da influência de cada mecanismo físico na modelagem do comportamento dinâmico da suspensão. Nas etapas de validação do código utilizando a comparação dos valores numéricos da magnetização de equilíbrio da suspensão com valores de modelos teóricos as forças Brownianas são novamente ligadas e o parâmetro α passa a ser novamente utilizado sem nenhuma inconsistência física. Uma discussão detalhada das diferentes formas de se adimensionalizar a equação governante deste problema é feita no *Apêndice C* desta Tese.

5.3 Testes numéricos preliminares

Com base na formulação apresentada foi escrito um código em linguagem FORTRAN, que possui como objetivo a realização de simulações computacionais paralelas que resolvam as equações do movimento simultaneamente para diversas realizações contendo diversas partículas em um box físico com dimensões finitas a fim de manter uma fração volumétrica de partículas pré-definida pelo usuário. Essas simulações dinâmicas evoluem no tempo por um período pré-estabelecido e definido pelo usuário ou até que todas as partículas sedimentem e alcancem o fundo do box. A presente seção possui como objetivo ilustrar uma série de testes numéricos preliminares que visam validar a metodologia proposta e o código desenvolvido.

O código confeccionado permite incluir ou não movimento Browniano, acionar ou desativar a força gravitacional (suspensões com partículas livres ou não da ação líquida da gravidade), aplicar ou não um campo externo, além de permitir a fácil manipulação da intensidade de cada mecanismo físico de interesse através da definição dos parâmetros adimensionais específicos que regem a dinâmica microestrutural, como St , Pe , α , α^* e ϕ para suspensões coloidais e no caso de suspensões não coloidais os parâmetros α , α^* e Pe são substituídos pelos parâmetros ψ_m e φ_m já definidos no capítulo referente ao problema de duas partículas.

A importância deste capítulo consiste basicamente em mostrar uma proposta de código computacional e sua validação através de diversos testes numéricos associados ao tempo de processamento, ao controle de forças de curto alcance para situações com inércia de partícula diferente de zero, à convergência do código e à obtenção de valores de propriedades de transporte da suspensão, como a magnetização de equilíbrio desta em boa concordância com valores teóricos consolidados na literatura.

5.3.1 Tempo de processamento

Simulações diretas de sistemas particulados geralmente apresentam um alto custo computacional, pois resolvem simultaneamente diversas equações diferenciais na tentativa de modelagem do comportamento de um número muito grande de partículas. Além disso, para que se possa obter valores confiáveis de propriedades de transporte com base em análise estatística, é necessária a realização de diversos experimentos numéricos, ou realizações que precisam evoluir no tempo ao longo de diversos passos de tempo em um processo iterativo.

A fim de se estudar novas tecnologias de processamento paralelo foram desenvolvidas duas versões do código, uma utilizando processamento serial e outra processamento paralelo com OpenMP, na qual a paralelização é feita nos núcleos do processador (e não nos núcleos do placa gráfica, como na tecnologia GPGPU). Após a compilação destas duas versões do código, foi feita uma análise do custo computacional em função do número de partículas para uma quantidade pré-definida de realizações. Foi computado o tempo de CPU necessário para a execução de 10 iterações no tempo de 15 realizações simultâneas de um número N de partículas. Os cálculos foram executados em uma máquina com processador I7 contendo 8 núcleos.

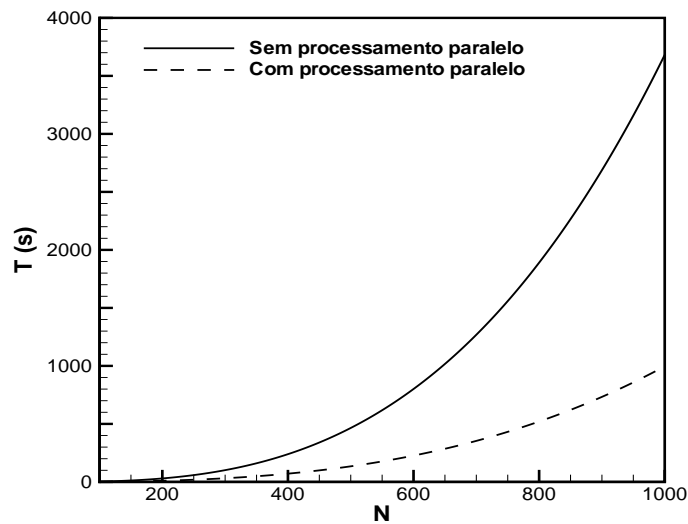


Figura 5.3: Ganho de custo computacional através de programação paralela

A figura (5.3) ilustra o resultado obtido nesta análise. É possível observar que o custo computacional cresce com N^2 , em que N representa o número de partículas. Além disso pode-se observar um ganho considerável no custo computacional do processo através da paralelização da execução das simulações. Este ganho na economia de custo computacional é essencial para que se possa executar simulações envolvendo muitas partículas em períodos

de tempo menores.

É interessante falar que a paralelização do código foi feita no âmbito das partículas e não das realizações, ou seja, para cada realização as forças que atuam em cada grupo de partículas são determinadas em cada processador. Optou-se por essa filosofia de processamento paralelo, visto que o custo computacional aumenta de forma mais expressiva com o número de partículas do que com o número de realizações, além disso um aumento no número de partículas permite uma diminuição no número de realizações para que se consigam resultados estatisticamente significativos.

5.3.2 Flutuações de velocidade em suspensões magnéticas

Sabe-se que a dinâmica de suspensões coloidais não-magnéticas possui um comportamento das flutuações de velocidade estatisticamente estacionário, ou seja, ao se analisar a evolução temporal da variância das velocidades de partículas em cima de diversas partículas e realizações o que se observa é um comportamento que oscila em torno de uma média constante ao longo do tempo.

Primeiramente foi avaliado o comportamento da variância de velocidades para uma suspensão coloidal magnética. O cálculo da variância foi feito através da seguinte sequência de procedimentos.

Para cada realização determina-se a velocidade média da suspensão em cada passo de tempo, através de uma média em cima da velocidade de todas as partículas:

$$\bar{\mathbf{u}}(j, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i(j, t), \quad (5.21)$$

o índice inferior i denota uma partícula i pertencente àquela realização j . A barra superior é utilizada para definir a velocidade média da suspensão em uma realização em dado instante de tempo. Em seguida para cada realização determina-se a variância de velocidade de cada partícula e em cada passo de tempo, da seguinte forma:

$$\mathbf{u}'^2_i(j, t) = [\mathbf{u}_i(j, t) - \bar{\mathbf{u}}(j, t)]^2. \quad (5.22)$$

Após este cálculo é tirada uma média da variância $\mathbf{u}'^2_i(j, t)$ em cima das partículas e das realizações da forma:

$$\langle \mathbf{u}'^2(t) \rangle = \frac{1}{N_{rea}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N_{rea}} \sum_{i=1}^N \mathbf{u}'^2_i(j, t), \quad (5.23)$$

em que N_{rea} denota o número de realizações consideradas. Desta forma é possível avaliar o comportamento das flutuações de velocidades induzidas por interação magnética em um

suspensão coloidal-magnética, através do comportamento da função $\sigma(t)$. É importante ressaltar que esta função $\sigma(t)$ é na verdade uma função avaliada em cada uma das três direções do movimento. De modo que a mesma pode ser decomposta como

$$\langle \mathbf{u}'^2(t) \rangle = \langle u'^2(t) \rangle \hat{\mathbf{e}}_x + \langle v'^2(t) \rangle \hat{\mathbf{e}}_y + \langle w'^2(t) \rangle \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (5.24)$$

em alguns casos será tratado do módulo da função $\langle |\mathbf{u}'^2(t)| \rangle$, dado por

$$\langle |\mathbf{u}'^2(t)| \rangle = \sqrt{\langle u'^2(t) \rangle^2 + \langle v'^2(t) \rangle^2 + \langle w'^2(t) \rangle^2}. \quad (5.25)$$

A primeira análise acerca do comportamento das flutuações de velocidades induzidas por interações magnéticas entre os momentos de dipolo das partículas ferromagnéticas que compõem a suspensão consiste na verificação do comportamento da função $\langle |\mathbf{u}'^2(t)| \rangle$ ao longo do tempo. Para tanto foram realizadas 10 realizações simultâneas envolvendo 300 partículas em um box físico cúbico sem a aplicação de um campo magnético externo, desligando-se o campo gravitacional (partículas *neutrally buoyant*) e deixando ligado apenas os mecanismos de interação magnética entre os momentos de dipolo das partículas, o arrasto viscoso, o movimento browniano de baixa intensidade e forças de lubrificação repulsivas entre partículas e entre partícula-parede. Os parâmetros físicos desta análise inicial são $Pe \rightarrow \infty$, $St = 0.1$ e $\psi_m = 20$, os parâmetros rotacionais associados aos apresentados acima são os mesmos, estes parâmetros caracterizam uma condição de pequena inércia de partícula, nenhuma flutuação de velocidade induzida por movimento browniano e uma condição de interação magnética entre os momentos de dipolo das partículas considerável de modo a induzir flutuações de velocidade provocadas por efeitos de interações magnéticas. A variável analisada inicialmente é a variância calculada pela equação (5.25).

O comportamento observado nesta análise é apresentado na figura (5.4). O gráfico da figura (5.4) indica a presença de diversos picos nos valores da variância das velocidades em uma suspensão magnética. Estes picos são intercalados por períodos de comportamento constante, nos quais a dinâmica destas suspensões apresenta um comportamento estatisticamente estacionário. Este comportamento ocorre devido à formação de agregados ao longo da evolução dinâmica da suspensão. Em determinados momentos uma partícula encontra-se suficientemente próxima de outra e com tal orientação do vetor momento de dipolo de modo que a consequência deste encontro é a formação de um pequeno agregado. Durante o processo de aproximação entre estas duas partículas a velocidade de ambas aumenta consideravelmente, distoando fortemente da velocidade média da suspensão naquele instante de tempo. Ao longo deste processo de formação de um agregado ocorre um pico no comportamento da variância da suspensão. A fim de confirmar esta explicação foi feita uma ampliação em um dos picos da variância e ao lado plotou-se a quantidade de trímeros (partículas com três agregados) para aquele conjunto de realizações simultâneas no mesmo intervalo de tempo. Este resultado está apresentado na figura (5.5).

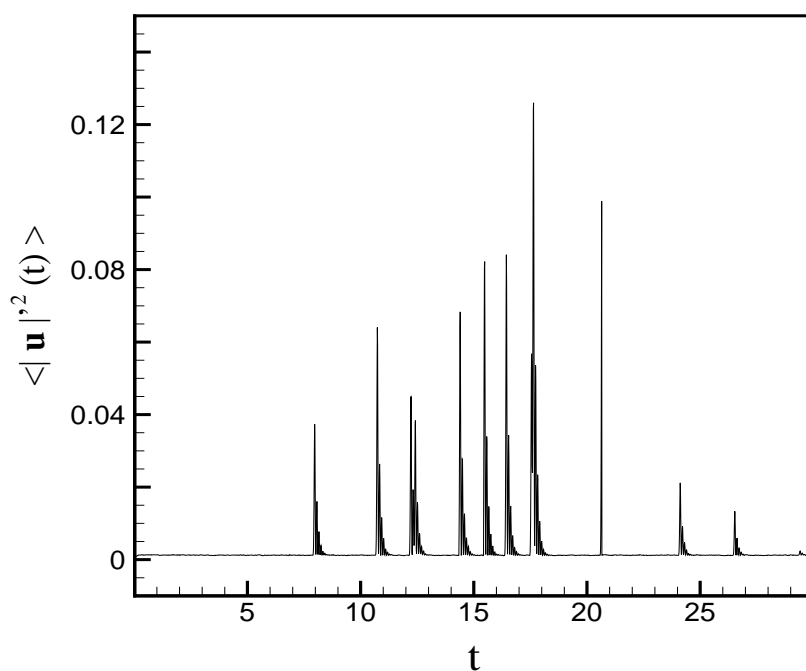


Figura 5.4: Comportamento da variância ao longo do tempo para uma suspensão magnética

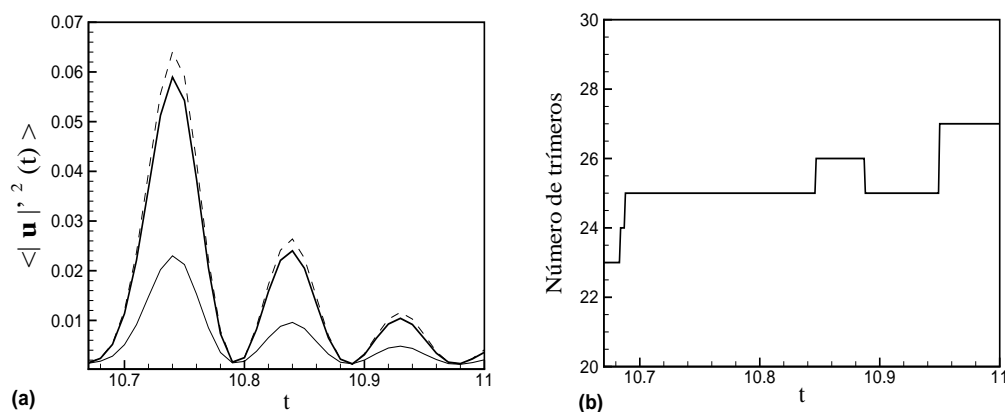


Figura 5.5: (a) Comportamento da variância ao longo do tempo para uma suspensão magnética, a linha tracejada denota a variância do sistema na direção da gravidade (eixo z), a linha contínua mais fina representa esta variável na direção x e a linha contínua mais grossa simboliza a variância na direção y. Na figura (b) é possível observar a evolução da quantidade de trimeros em cima de diversas realizações para o mesmo intervalo de tempo utilizado na confecção da figura (a).

É possível observar que um aumento na quantidade de trimeros induz um pico no comportamento da variância da suspensão, que por sua vez tende a voltar para o patamar de variância constante, típico de um processo estatisticamente estacionário no qual as flutuações de velocidade da suspensão são induzidas por interações magnéticas não determinísticas. Este

comportamento se mantém enquanto o número de trímeros permanece constante. A partir do momento em que um novo agregado se forma a variância da velocidade da suspensão responde com um novo pico. A análise feita contando-se apenas o número de trímeros serva para justificar o comportamento observado na figura (5.4). É importante frisar que ao longo deste processo de evolução temporal diversos agregados são formados, não só trímeros, mas também dímeros e agregados maiores. Ao longo do presente texto a variância será utilizada como uma variável importante para uma análise prévia do desempenho do código e também para a quantificação do comportamento das flutuações de velocidade induzidas por interação magnética em função de outros parâmetros importantes. A análise feita a partir do presente momento em cima da variância considera seu valor apenas nas regiões nas quais a mesma se mantém constante ao longo do tempo.

5.3.3 Determinação da parte ativa da suspensão

A análise estatística do comportamento de uma suspensão de esferas em um box finito com paredes físicas deve ser feita em cima daquelas partículas que estão suficientemente distantes da parede, de modo que seu comportamento é pouco influenciado pela presença da mesma, conforme mostra a figura (5.6). Quando se fala na determinação de propriedades de

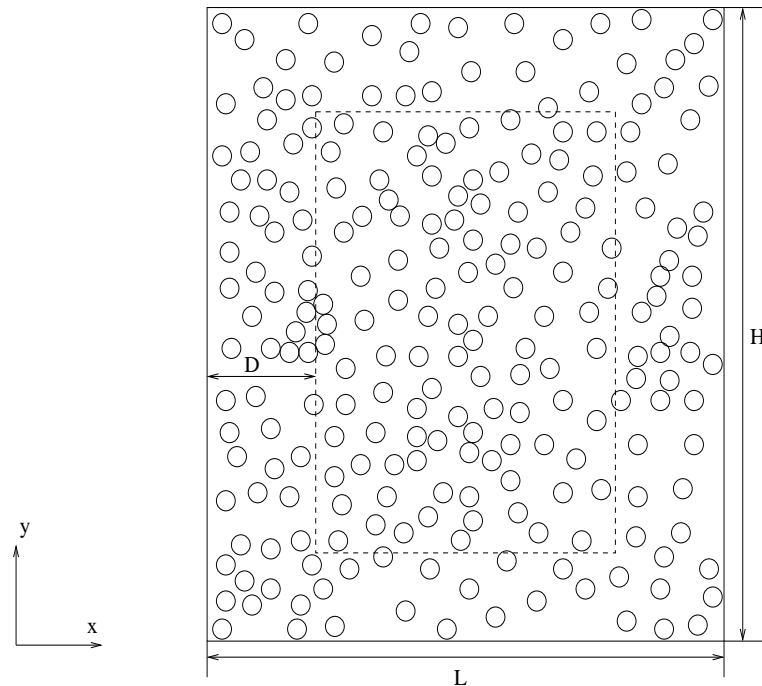


Figura 5.6: Ilustração da parte ativa de uma suspensão

transporte em cima de análises estatísticas, na verdade está se avaliando uma propriedade local em um volume do contínuo, suficientemente grande para conter um número suficientemente grande de moléculas ou no presente caso partículas, mas suficientemente pequeno

para que o mesmo seja considerado um ponto físico. As partículas presentes em um volume com estas características que serão analisadas para que se possa inferir uma propriedade local não devem ser influenciadas pela existência de uma parede física, de modo que deve-se determinar uma parte da suspensão na qual esta hipótese é válida. Existe uma distância D entre um box imaginário no interior do box físico no qual a análise estatística é realizada. Esta distância é suficientemente grande para que se esteja analisando o comportamento de uma suspensão com um número significativo de partículas do ponto de vista estatístico, mas suficientemente afastada da parede de modo que o movimento destas partículas seja pouco afetado pela presença de um contorno sólido nas imediações daquele grupo de partículas.

A fim de se determinar a distância da parede na qual o comportamento da suspensão é pouco influenciado pela presença do contorno sólido foi feito um experimento simples no laboratório de Microhidrodinâmica e Reologia do Grupo Vortex no qual uma esfera de plástico com massa de $0,2922g \pm 0,0033g$ e diâmetro de $5,84mm \pm 0,03mm$ foi colocada para sedimentar em um *box* de vidro contendo óleo de silicone, fluido de viscosidade $\eta = 95000cP$. O processo de sedimentação foi filmado e uma análise de imagens determinou a velocidade na qual esta partícula alcança o fundo do box. Foi observado que a esfera, com $St = 5,51 \cdot 10^{-6}$ e $Re_p \sim 10^{-4}$ (em que Re_p é o número de Reynolds de partícula) alcança o fundo do box com uma velocidade em torno de 10% da velocidade de Stokes (neste experimento $U_s = 2,88mm/s$), ou seja, existe uma frenagem desta ao se aproximar do fundo do recipiente devido à interação entre a parede inferior do *box* e a partícula. A figura (5.7) ilustra os materiais utilizados neste experimento.

Do ponto de vista numérico a simulação do processo de sedimentação considerando inércia de partícula para valores extremamente pequenos do número de Stokes gera problemas sérios de instabilidade (associados à divisões por números muito pequenos), de modo que optou-se por calibrar as constantes da força de repulsão entre parede e partícula que fizessem com que a mesma alcançasse o fundo do box com uma velocidade igual a 20% da velocidade de Stokes para uma condição de $St = 0.1$. Isto se justifica já que partículas com maior inércia demoram mais tempo para responder à qualquer alteração que a parede tente impor ao movimento da mesma, fazendo com que a tentativa do movimento na direção paralela à da gravidade da partícula por parte da parede inferior do recipiente seja menos efetiva do que seria caso o número de Stokes da partícula fosse menor, fazendo com que a esfera alcance o fundo do box com uma velocidade maior. O gráfico da figura (5.8) ilustra o comportamento numérico da relaxação e frenagem de uma partícula em um box com paredes físicas para diferentes condições de número de Stokes.

É interessante notar que partículas com maior inércia enxergam pouco o fundo do box e atingem o mesmo com uma velocidade relativamente alta em relação ao comportamento

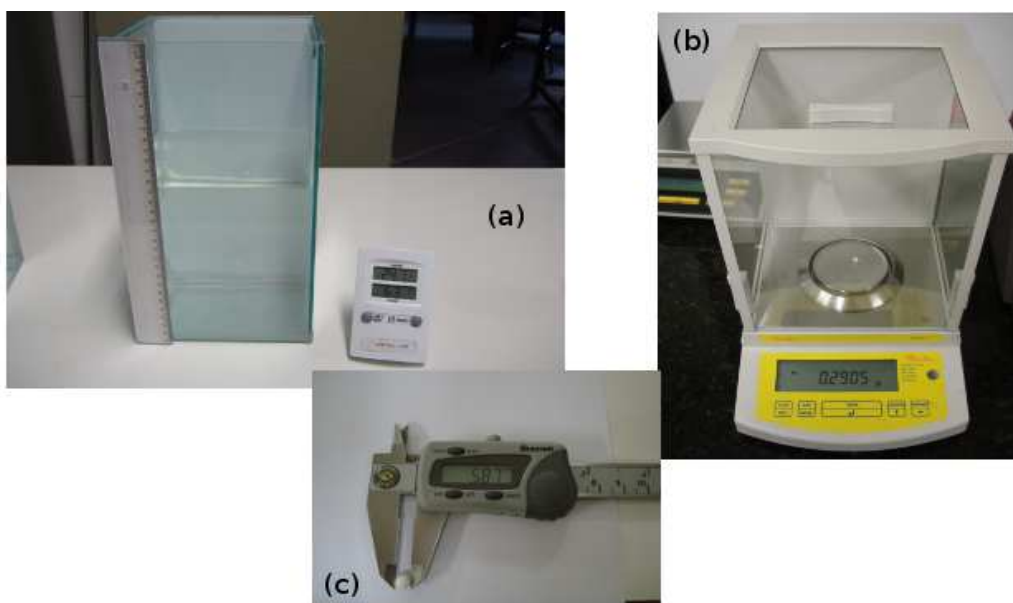


Figura 5.7: Aparato experimental para avaliar a frenagem de uma partícula devido à presença da parede - (a) box de vidro com óleo de silicone, (b) balança digital para medir a massa da esfera e (c) paquímetro digital para determinação do diâmetro da esfera

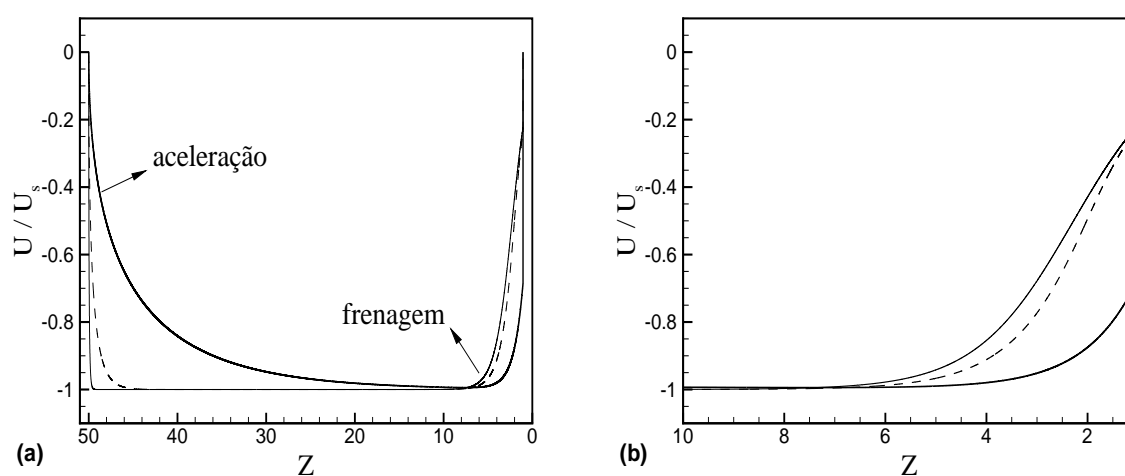


Figura 5.8: Relaxação e frenagem de uma partícula em um box físico. A figura (a) mostra a aceleração e frenagem de uma partícula devido à presença da parede inferior de um recipiente físico. A linha grossa denota o comportamento para $St = 10$, a linha tracejada para $St = 1$ e a linha contínua fina para $St = 0.1$. A figura (b) mostra ampliação do comportamento observado em (a) para a faixa final do movimento da partícula

observado para partículas com menor inércia. Além disso pode-se observar que para uma distância equivalente a $4a$, em que a denota o raio da partícula, a velocidade de sedimentação

de uma partícula com $St = 0.1$ é em torno de 80% da velocidade de Stokes, nesta condição a partícula não foi afetada de forma tão significativa pela existência de uma parede física em suas proximidades. É claro que esta análise serve apenas como um indicativo da ordem de magnitude das distâncias entre as paredes de um recipiente físico e partículas inseridas neste em meio a um fluido viscoso sujeitas a escoamentos em baixos números de Reynolds, nas quais esta interação partícula-parede é muito significativa.

Uma análise mais interessante para que se possa definir o valor D para a parte ativa de uma suspensão consiste no comportamento das flutuações de velocidades em função do valor de D . Para esta análise foram executadas 3 realizações simultâneas para 500 partículas. O valor de D foi sendo alterado de 0 a 5. Um campo magnético externo foi acionado e os parâmetros físicos desta análise foram: $Pe \rightarrow \infty$, $St = 0.1$, $\psi_m = \varphi_m = 10$. A figura (5.9) mostra o número médio de partículas em cada passo de tempo na parte ativa da suspensão, considerando todas as realizações simultâneas. Nota-se que para uma distância D igual a $4a$ a quantidade de partículas na parte ativa da suspensão oscila em torno de 1000 partículas (para as três realizações) a cada passo de tempo. A figura (5.10) ilustra o comportamento

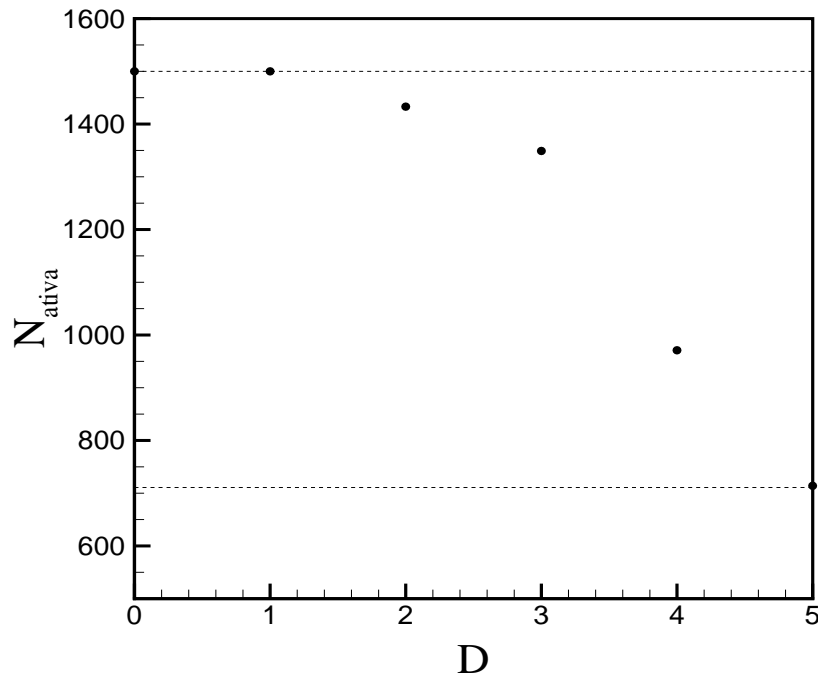


Figura 5.9: Número médio de partículas na parte ativa da suspensão em função de D

da variância em função de D , observa-se uma saturação neste comportamento a partir de $D = 4a$. Como para esta distância à parede a velocidade uma partícula isolada ainda não foi alterada de forma significativa pela existência do contorno sólido e a variância apresenta um comportamento de saturação, foi definida que a parte ativa da suspensão será constituída pelo volume imaginário de um box interno ao box real em que cada face encontra-se a uma distância

igual a quatro vezes o raio da partícula da parede física. Desta maneira, todas as análises realizadas a partir deste ponto considerarão uma parte ativa com esta dimensão. Isto só vale, é claro, para problemas nos quais serão consideradas paredes físicas englobando a suspensão. No próximo capítulo, onde interações hidrodinâmicas de longo alcance serão adicionadas à física do problema e condições de contorno periódicas passarão a ser utilizadas para computar estas interações, não existirá uma parede física e portanto todas as partículas da suspensão serão consideradas como pertencentes à parte ativa para fins estatísticos. É interessante notar a grande barra de erro para o valor da variância quando $D = 0$. Isso ocorre devido ao fato de que a parede influencia fortemente partículas que encontram-se muito próximas a esta, fazendo com que a velocidade das partículas mais próximas ao contorno sólido sejam muito diferentes das velocidades de partículas mais afastadas da parede aumentando a barra de erro da variância no ponto em que todas as partículas da suspensão são consideradas a fins de análise estatística.

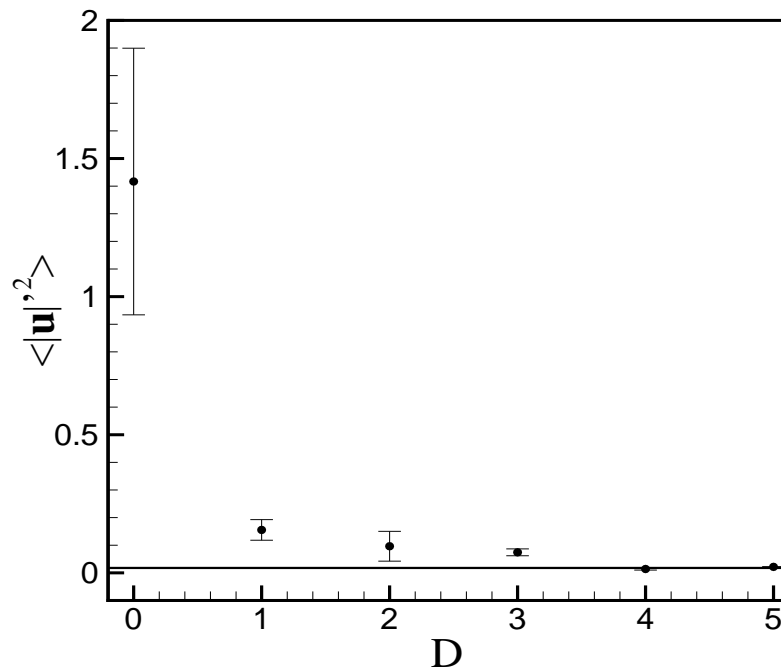


Figura 5.10: Variância da parte ativa da suspensão em função de D

5.3.4 Singularidades numéricas - formação de um dímero

O processo numérico de formação de um dímero constitui em uma atração por forças de interação magnéticas que cresce de forma muito acentuada quando as partículas vão se aproximando. Este crescimento é proporcional a $1/r^4$ em que r representa a distância entre os

centros das partículas. Caso a força por interação magnética não seja desligada em nenhum momento ao longo do processo de formação de um dímero os valores da velocidade das partículas crescem de forma tão acentuada que mesmo a imposição de forças de repulsão e de contato não são capazes de evitar problemas de singularidades numéricas. Do ponto de vista numérico é mais viável desligar a força de interação magnética entre partículas muito próximas para evitar este tipo de inconveniente. A partir de uma calibração consistente do passo de tempo numérico, este tipo de singularidade só se apresenta quando se consideram efeitos de inércia de partícula.

Uma calibração meticulosa da distância mínima entre o centro de duas partículas para que se evitassem problemas numéricos na formação de agregados foi realizada para diferentes valores de St e ψ_m . Neste caso optou-se por desligar totalmente as forças e torques Brownianos, de modo que $Pe \rightarrow \infty$. Para tanto duas partículas foram separadas por uma distância equivalente a $10a$ e seus momentos de dipolo foram definidos de forma a induzir a formação de um dímero. Para cada valor de número de Stokes foram realizadas simulações variando o parâmetro de interação magnética ψ_m e o valor da distância mínima entre os centros das esferas no qual forças por interação magnéticas devem ser desligadas foi calibrado. A figura (5.11) ilustra o esquema utilizado para a realização desta calibração. A calibração foi feita

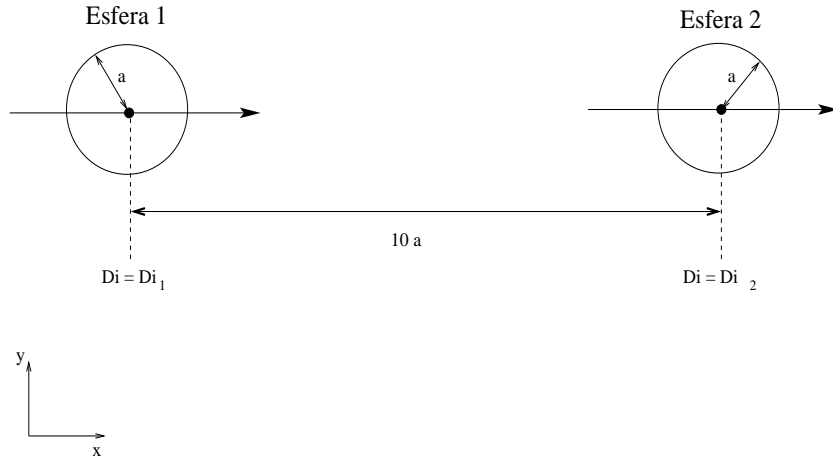


Figura 5.11: Esquema utilizado para a calibração da distância mínima entre centros na qual a força magnética deve ser desligada. Os dipolos das partículas são setados como idênticos e estão alinhados na direção de separação das esferas, o que gera uma força líquida de atração entre estas.

de modo que a distância entre o centro das esferas se estabilizasse em um patamar constante maior do que $2a$ para evitar overlap entre partículas sem a necessidade de se ativar uma força de contato. Os valores desta distância mínima são dados na figura (5.12). O comportamento do gap mínimo em função do parâmetro magnético pode ser muito bem aproximado por um ajuste do tipo power-law dados pelas seguintes expressões:

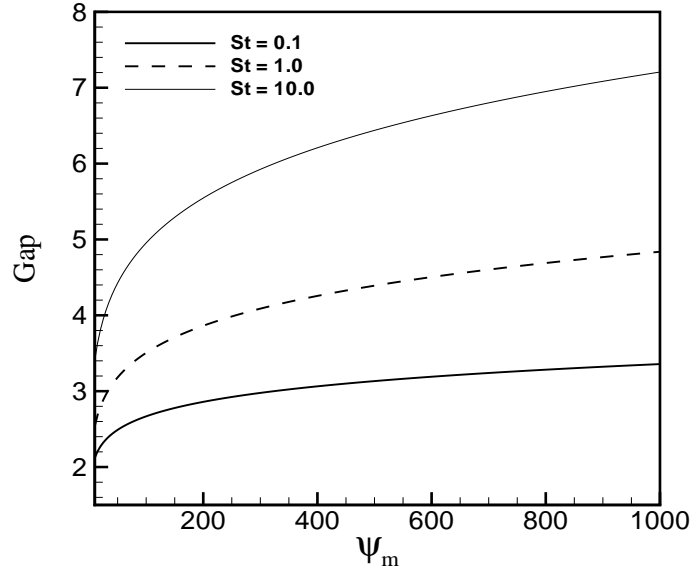


Figura 5.12: Distância mínima entre centros na qual a força magnética deve ser desligada em função de ψ_m

- Para $St = 0.1$:

$$Gap(\psi_m) = 1.6853\psi_m^{0.0975}. \quad (5.26)$$

- Para $St = 1.0$:

$$Gap(\psi_m) = 1.8401\psi_m^{0.1399}. \quad (5.27)$$

- Para $St = 10.0$:

$$Gap(\psi_m) = 2.3409\psi_m^{0.1628}. \quad (5.28)$$

É possível notar que conforme o número de Stokes aumenta a distância entre os centros das partículas na qual a força por interação magnética deve ser desligada para que se evitem problemas de singularidades numéricas sem sentido físico deve aumentar de forma mais acentuada. Isto ocorre porque para valores maiores de St a partícula possui mais inércia e mesmo após o desligamento da força atrativa a mesma continua seu movimento determinístico de atração que vai sendo freado pelo arrasto viscoso até que forças de repulsão por efeito de lubrificação passem a atuar na partícula a fim de tentar evitar um *overlap* numérico. A figura (5.13) ilustra o comportamento da distância entre os centros das partículas com relação ao tempo para diferentes condições numéricas. A figura (5.13.a) mostra que ao não se desligar a força de interação magnética conforme duas partículas vão se aproximando o comportamento da formação de um dímero não corresponde à realidade física e as partículas acabam se distanciando de forma abrupta a partir do momento em que uma partícula entra dentro da outra e o valor numérico desta força de atração explode. Já as figuras (5.13.b) e (5.13.c) mostram

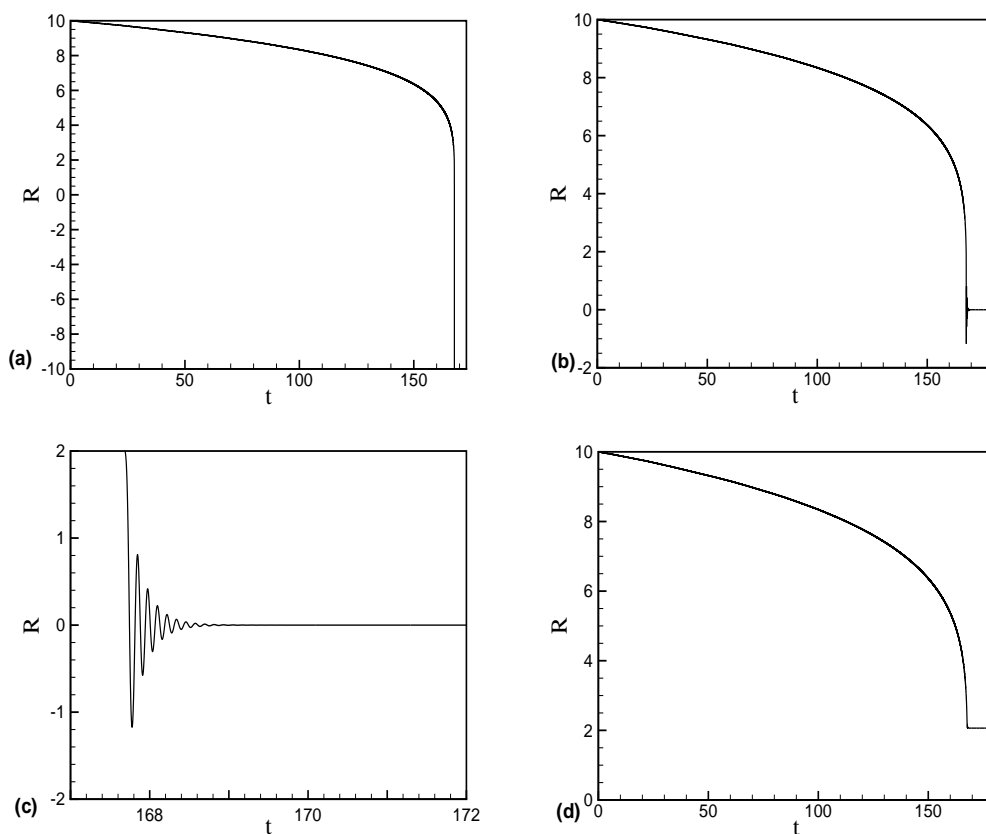


Figura 5.13: Comportamento da distância entre centros com relação ao tempo. (a) Força magnética sempre ligada, (b) força magnética desligada para distância entre centros igual a $2a$, (c) ampliação do comportamento observado em (b) e (d) força magnética desligada em uma distância calibrada corretamente

que ao se desligar a força de interação magnética apenas no momento em que as superfícies das esferas encostam uma na outra a inércia do movimento faz com que uma partícula entre dentro da outra, a partir deste momento uma força de Hertz é acionada que tenta repelir as partículas, porém o que a mesma faz é apenas frear o movimento de interpenetração das esferas até o momento em que uma esfera ultrapassa a outra e finalmente responde a aplicação de uma força repulsiva alguns passos de tempo atrás (é importante lembrar que a resposta da dinâmica é sempre defasada da excitação devido ao efeito de inércia da partícula) e tenta sair de dentro desta. Este movimento oscilatório ocorre até que se estabelece uma condição permanente em que uma esfera repousa exatamente no interior da outra. É evidente que este comportamento numérico não possui sentido físico e que ocorre porque do ponto de vista numérico é extremamente complicado trabalhar com sistemas que possuem inércia e com forças de atração com crescimento tão acentuado de forma simultânea. A figura (5.13.d) mostra o comportamento observado quando a força de atração magnética é desligada a partir de uma distância mínima entre os centros calibrada conforme descrito anteriormente. Neste

caso as partículas formam um dímero de modo suave e coerente com a realidade física do processo, sem qualquer problema de *overlap*.

5.3.5 Convergência de propriedades estatísticas em função do tamanho do sistema

Da literatura especializada sabe-se que o decaimento lento de interações hidrodinâmicas ($1/r$) gera sérios problemas de convergência das propriedades de transporte que variam de acordo com o tamanho do sistema. Em uma simulação dinâmica de um sistema particulado com interações apenas de origem hidrodinâmica em um box com paredes físicas esta divergência no valor de propriedades estatísticas como a variância de velocidades se apresenta naturalmente. Do ponto de vista físico esta divergência está associada à ordem de magnitude do decaimento de interações hidrodinâmicas, pois a faixa de ação destas interações é da mesma ordem que o próprio tamanho do sistema. No caso de interações magnéticas, as mesmas decaem com $1/r^4$ para a força e $1/r^3$ para o torque, um decaimento relativamente rápido. A presente análise mostra que para este tipo de interação propriedades de transporte como velocidade média, variância e magnetização convergem de acordo com variações no tamanho do sistema. A validação proposta constitui os seguintes passos.

1. Define-se uma fração volumétrica fixa;
2. Realizam-se diversas simulações alterando-se o número de partículas, de modo a manter uma fração volumétrica constante, ou seja, o tamanho do box vai sendo alterado conforme o número de partículas é alterado;
3. A condição na qual as simulações são realizadas busca suprimir qualquer tipo de flutuação induzida por movimento browniano, para que flutuações induzidas por interações magnéticas sejam percebidas de forma significativa, de modo que os parâmetros físicos definidos na simulação são: $Pe \rightarrow \infty, St = 0.1$ e $\psi_m = 10$;
4. Para avaliação da velocidade média e variância o campo externo foi desligado, de modo que avaliou-se a convergência destas propriedades focando-se apenas nas interações magnéticas entre momentos de dipolo;
5. Para avaliação da convergência da magnetização de equilíbrio um campo externo foi aplicado e o parâmetro associado à este campo foi definido como $\alpha = 10$, além disso para a avaliação da convergência da magnetização verificou-se que a mesma converge mais rapidamente no tempo para menores valores de Pe , precisando de menos iterações para se obter um resultado em regime permanente, desta forma para a avaliação do

comportamento da magnetização de equilíbrio foram realizadas simulações com $Pe = 1.0$.

O primeiro resultado desta análise mostra o comportamento da velocidade média nas três direções para uma simulação com fração volumétrica igual a $\phi = 1.0\%$, com 300 partículas e parâmetros definidos como no passo 3. Percebe-se pela figura (5.14) que estas interações magnéticas geram velocidades nas direções perpendiculares à gravidade que flutuam em torno de zero e um comportamento praticamente idêntico ao de uma esfera sedimentando em regime de Stokes, sem interação hidrodinâmica com outras esferas, na direção paralela à gravidade. Diferentemente de uma situação em que existe o chamado *back-flow* produzido pela resposta ao deslocamento de fluido na direção da sedimentação contra o fundo do box, o problema sem interações hidrodinâmicas não altera de forma significativa o comportamento da velocidade média de sedimentação, de modo que esta não é uma grandeza estatística interessante para se avaliar a questão de convergência de propriedades médias com a variação do tamanho do sistema. Desta forma, a análise da variância se mostra muito mais interessante para se

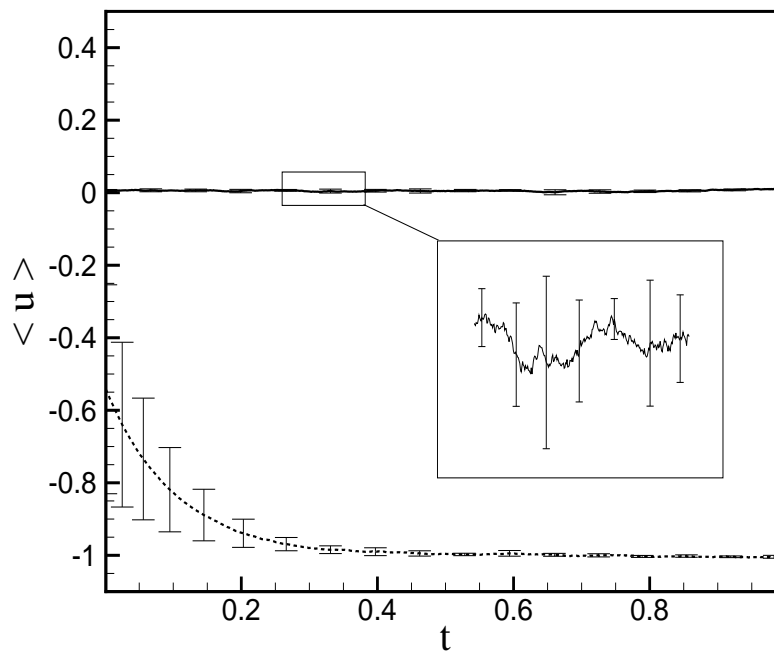


Figura 5.14: Velocidade média de uma suspensão magnética em função do tempo. A linha contínua denota a variação de uma das componentes perpendiculares à gravidade e a linha tracejada representa a componente de velocidade na direção da gravidade. O encarte representa uma ampliação do comportamento observado na direção perpendicular à gravidade.

avaliar se o tamanho do sistema influencia o valor desta propriedade e se a mesma satura com o aumento do sistema. A figura (5.15) mostra uma variação significativa desta propriedade

com variações no tamanho do sistema e indica também a existência de um platô onde esta propriedade satura. Esta análise é importante, pois fornece uma idéia do número de partículas a serem utilizadas em análises futuras. É possível notar uma convergência mais rápida para menores frações volumétricas, condição de menor interação magnética. A figura (5.16) mostra

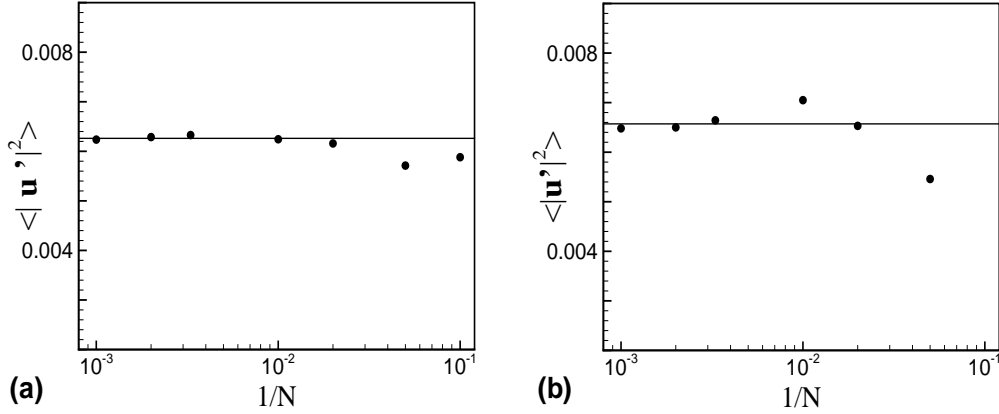


Figura 5.15: Variância em função do tamanho do sistema para (a) $\phi = 0.1\%$ e (b) $\phi = 1.0\%$. É possível notar que em ambos os casos as interações magnéticas que decaem com $1/r^4$ levam a uma estatística convergente para a variância do sistema particulado.

o comportamento observado para a magnetização de equilíbrio para uma fração volumétrica $\phi = 5.0\%$. Observa-se uma convergência no valor desta propriedade conforme altera-se o tamanho do sistema.

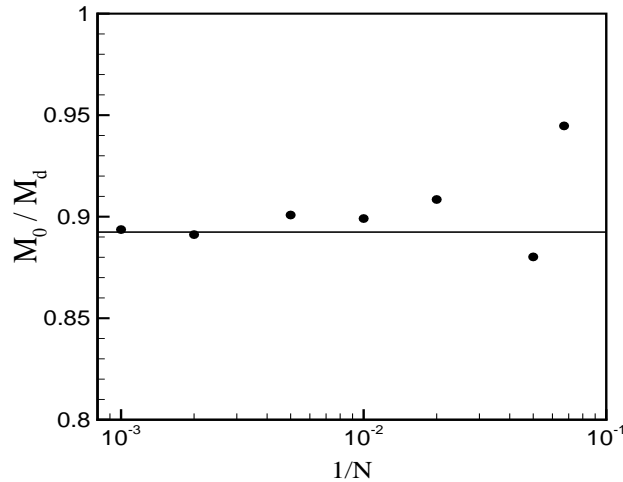


Figura 5.16: Magnetização de equilíbrio em função do tamanho do sistema - $\phi = 5.0\%$. É possível observar uma rápida convergência desta propriedade em função do tamanho do sistema para a condição de $\alpha^* = \alpha = 10$ e $Pe = 1$. Estudos mais detalhados em relação à convergência desta propriedade para valores menores de campo aplicado ($\alpha \sim 1$, que leva a um comportamento menos determinístico do sistema) serão feitos em seções futuras.

5.4 Formação de cadeias e trajetória de uma partícula teste

Uma figura interessante que mostra o efeito destas interações magnéticas entre momentos de dipolo de partículas é a a figura (5.17). A figura (5.17) mostra a trajetória de uma partícula

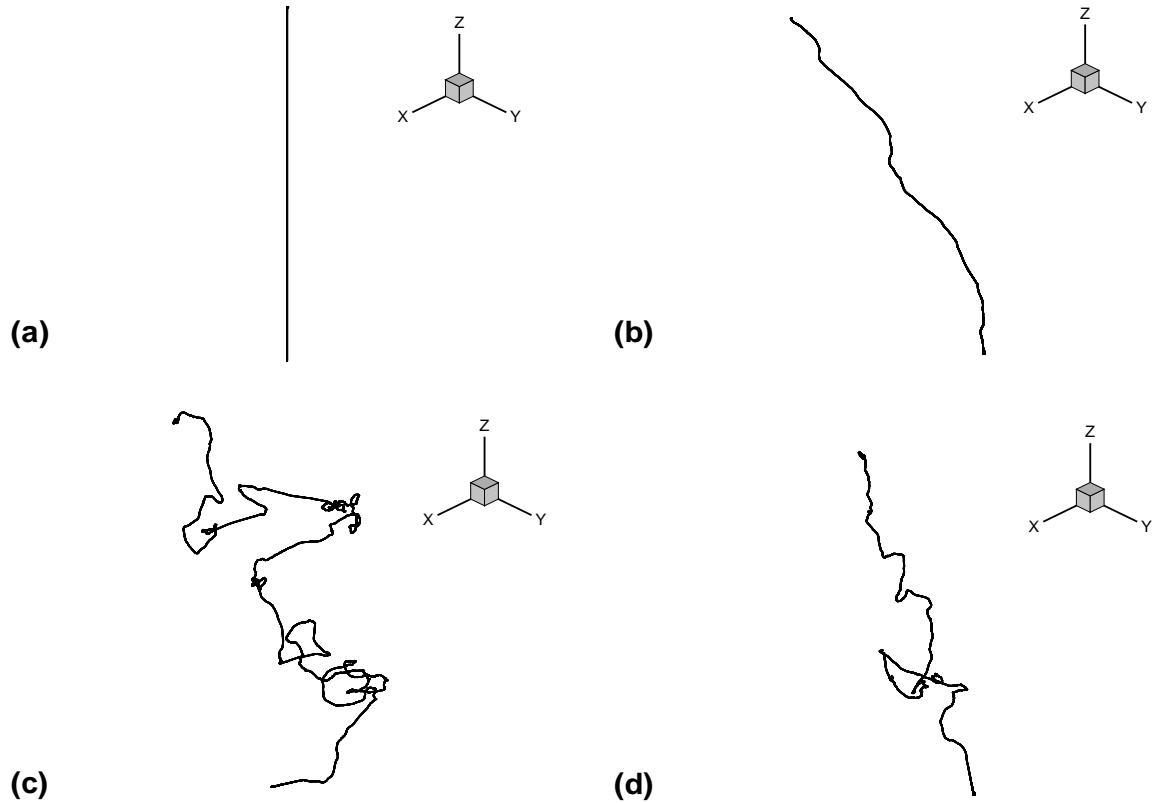


Figura 5.17: Trajetória de uma partícula teste em diferentes situações físicas. A figura (a) ilustra uma suspensão sem interações magnéticas sujeita apenas a ação da gravidade no limite em que $Pe \rightarrow \infty$, $\varphi_m = 0$. Já a figura (b) mostra a trajetória de uma partícula teste em uma suspensão sujeita apenas à ação da gravidade e interações magnéticas com $Pe \rightarrow \infty$ e $\psi_m = 20$. A letra (c) ilustra a trajetória de uma partícula teste em uma suspensão sem interações magnéticas, com movimento Browniano para valores de $Pe = 1$ e a figura (d) considera interações magnéticas e movimento browniano com $\alpha^* = 20$ e $Pe = 1$.

teste da suspensão para diferentes configurações dos parâmetros Pe , α^* e ψ_m no caso em que $Pe \rightarrow \infty$. Em todos os casos foram realizadas simulações com 200 partículas e a trajetória de uma partícula arbitrária foi analisada. Foram utilizadas poucas partículas neste caso, pois o interesse desta figura é apenas destacar a diferença de comportamento na trajetória de uma partícula qualquer pertencente a uma suspensão com muitos corpos do problema de duas partículas apresentado na seção anterior.

É possível perceber que apenas a presença de interações magnéticas entre os momentos

de dipolo das partículas que compõem uma suspensão magnética já é capaz de fornecer um caráter não linear ao movimento de uma partícula teste (5.17.b), diferentemente do comportamento da trajetória de sedimentação de uma partícula teste em uma suspensão sem interações magnéticas (5.17.a) e hidrodinâmicas.

Além disso é possível observar o efeito do movimento de uma partícula teste em uma suspensão coloidal sujeita unicamente à sedimentação diferencial e movimento browniano, sem interações magnéticas (5.17.c) e desta em uma suspensão coloidal magnética, na presença de interações magnéticas e movimento Browniano, (5.17.d). É importante reforçar que estas simulações foram realizadas para partículas com um pequeno efeito de inércia, de modo que a força randômica inserida na equação diferencial estocástica de Langevin, que serve como base para as presentes simulações, leva um certo passo de tempo a ser sentida pelas partículas. Desta forma o clássico comportamento *random-walk* Browniano não é observado neste tipo de simulação, diferentemente do que foi apresentado no Capítulo 7 do presente trabalho, no qual foram analisados os movimentos de uma partícula sujeita a movimento Browniano tanto nas condições com e sem inércia de partícula.

Um detalhe interessante observado na figura (5.17) é que em certo sentido o movimento de uma partícula teste na presença simultânea de interações magnéticas e movimento Browniano aparenta ser menos não linear do que o apresentado apenas na presença de movimento Browniano. Uma possível explicação para este fenômeno seria a formação de agregados no processo com interações magnéticas que poderiam diminuir a mobilidade uma partícula teste inserida no interior da suspensão, de modo análogo ao que ocorre em processos de estabilização de leitos fluidizados através da adição de partículas magnéticas na presença de um campo externo, conforme explorado por Sobra, Cunha e Gontijo (2013).

A fim de se explorar exemplos típicos de alterações microestruturais em suspensões magnéticas induzidas por mecanismos como interação partícula-partícula e interação campo-partícula, foram realizadas duas simulações do processo de evolução dinâmica de uma suspensão magnética não coloidal e livre da ação líquida da gravidade. No primeiro caso foram consideradas interações magnéticas entre as partículas da suspensão, na ausência de um campo externo aplicado. Já no segundo caso um campo externo foi adicionado. Nos dois casos as suspensões possuem 2000 partículas e as simulações foram realizadas durante um tempo adimensional equivalente à 40 tempos de Stokes. A fração volumétrica para os dois casos foi de 5% e o número de Péclet tende à infinito. No primeiro caso, na ausência de campo magnético o valor do parâmetro ψ_m associado à interação magnética entre as esferas foi definido como igual a 10 e o número de Stokes igual a 0.1. A imagem que ilustra o comportamento da suspensão através de uma comparação entre os estados inicial e final desta na ausência de campo externo é mostrada em (5.18).

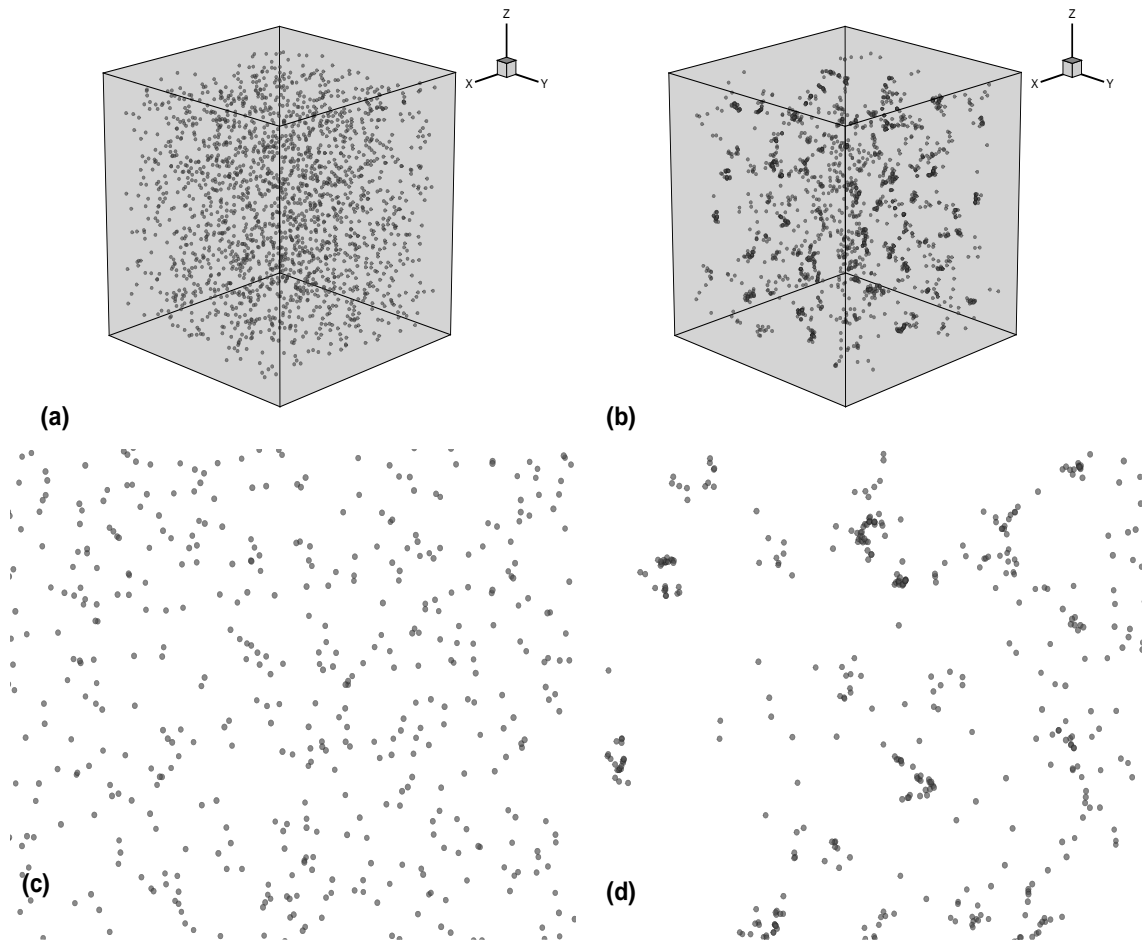


Figura 5.18: Evolução temporal do processo de formação de agregados em uma suspensão não-coloidal com interações magnéticas na ausência de um campo aplicado. A figura (a) mostra o instante inicial $t=0$, em (b) têm-se a imagem obtida para $t=40$ tempos de Stokes, em (c) e (d) têm-se a mesma configuração das figuras (a) e (b), porém com uma ampliação no centro do domínio de cálculo da suspensão.

É possível observar uma significativa alteração na microestrutura da suspensão entre os instantes inicial e final da simulação. Mesmo na ausência de um campo externo aplicado, os momentos de dipolo das partículas interagem de modo a formar estruturas agregativas. É importante falar que a condição inicial é gerada com a total ausência de agregados e que os mesmos são formados ao longo do processo simulação dinâmica de Langevin. É possível notar que os agregados na ausência de um campo externo aplicado não são formados ao longo de nenhuma direção preferencial, diferentemente do comportamento clássico conhecido na literatura e mostrado de forma experimental na primeira figura da introdução desta tese, no qual as partículas tendem a se alinhar na direção de um campo externo aplicado.

Já a figura (5.19) ilustra imagens de uma evolução temporal típica na presença de um campo externo aplicado obtida através do processamento pelo código confeccionado na pre-

sente Tese. Para a obtenção destas imagens foi realizada uma simulação com 2000 esferas com $St = 0.1$, $\psi_m = 10.0$, $\varphi_m = 10$, $\phi = 5.0\%$ e $Pe \rightarrow \infty$. O campo externo foi aplicado na parede superior do *box* no sentido paralelo ao da gravidade.

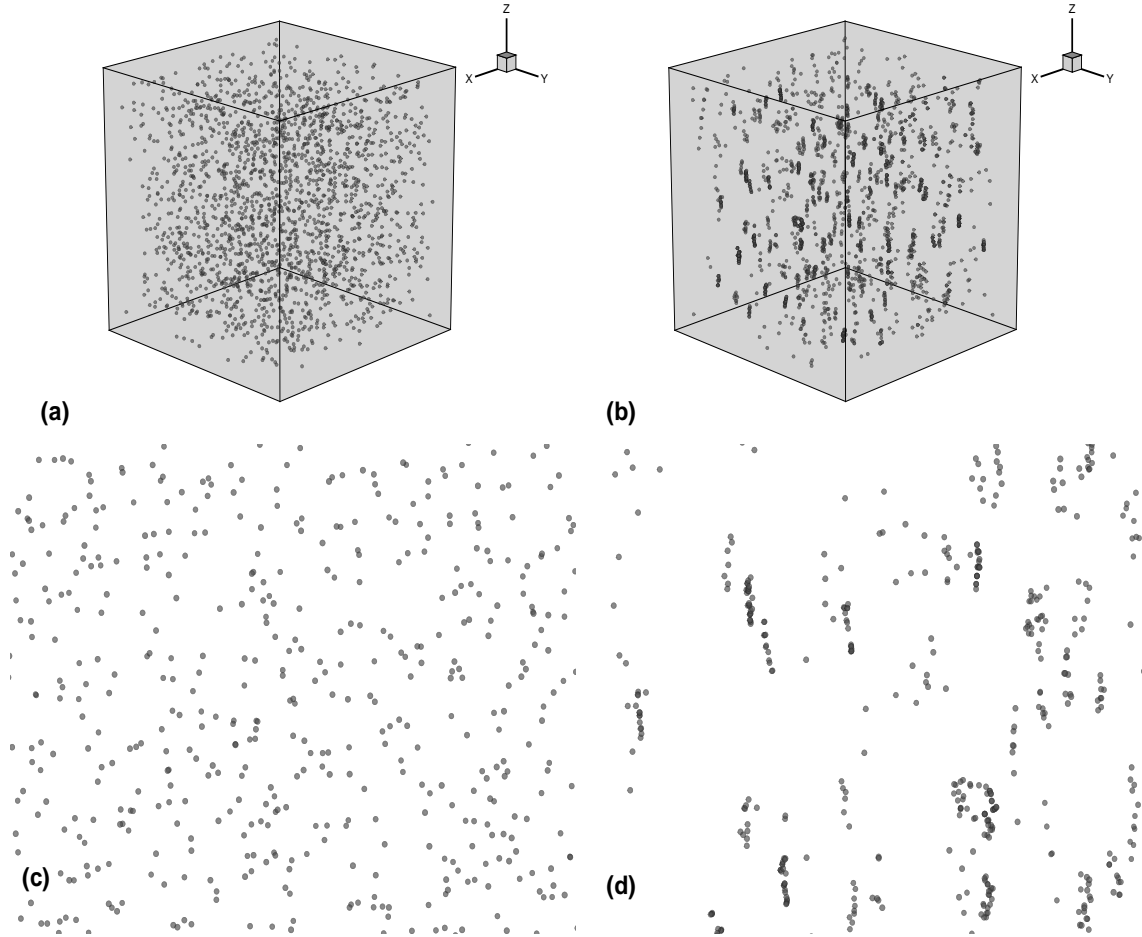


Figura 5.19: Evolução temporal do processo de formação de agregados em uma suspensão não-coloidal com interações magnéticas na presença de um campo aplicado. A figura (a) mostra o instante inicial $t=0$, em (b) têm-se a imagem obtida para $t=40$ tempos de Stokes. Em (c) é dado um detalhe da configuração inicial através de uma ampliação do centro da suspensão e em (d) é mostrado o mesmo detalhe, porém para $t=40$. É possível notar a formação de agregados alinhados na direção do campo aplicado, neste caso o eixo z .

Diversos fenômenos podem ser observados na sequência de imagens apresentada na figura (5.19). Primeiramente é possível notar uma tendência muito maior à formação de agregados, induzida pelo alinhamento dos momentos de dipolo das partículas na direção do campo externo aplicado. Do ponto de vista físico o que ocorre é que o torque magnético induzido pela interação rotacional entre o campo aplicado e as partículas faz com que estas tendam a girar de modo que se o campo aplicado for suficientemente grande, após um certo período a tendência é que todas as partículas estejam orientadas na direção deste. Obviamente que no caso de uma suspensão coloidal a dinâmica rotacional é regida por uma competição entre torques Brownianos que tentam randomizar a direção dos momentos de dipolo individuais de

cada partícula e um torque determinístico externo associado à aplicação do campo, além de torques induzidos por interações magnéticas entre as partículas da suspensão, que no caso de suspensões diluídas acaba se tornando um mecanismo mais fraco.

A figura (5.20) mostra a configuração da posição do momento de dipolo de cada uma das 2000 partículas em uma outra simulação nas mesmas condições utilizadas para a confecção da figura (5.19) em um instante de tempo $t = 4$. É possível notar que o alinhamento dos dipolos na direção do campo externo é muito mais rápido que a modificação microestrutural causada por este alinhamento. Isto indica que para que as partículas se alinhem na direção do campo aplicado é necessária uma rica dinâmica evolutiva associada às interações magnéticas entre as esferas, que só ocorre após o alinhamento dos dipolos destas na direção do campo.

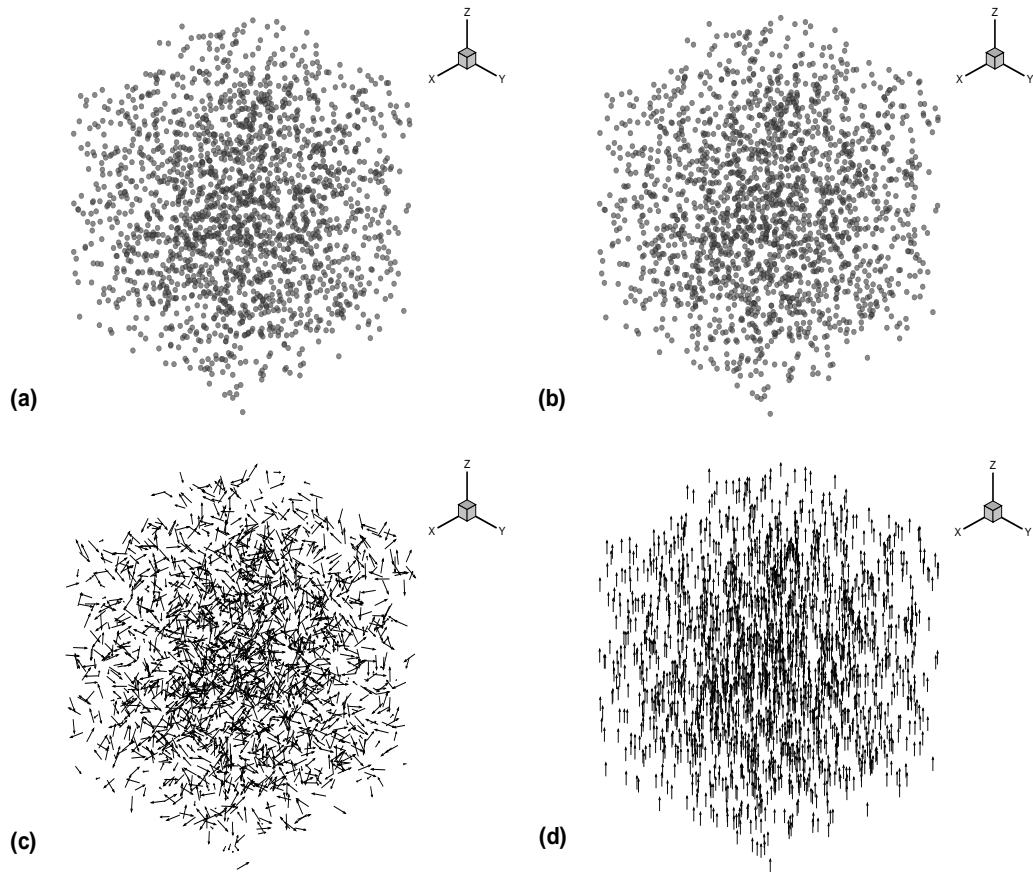


Figura 5.20: Configuração da posição das partículas e dos momentos de dipolo destas na condição de um campo externo aplicado para $St = 0.1$, $\psi_m = \varphi_m = 10$, $\phi = 5.0\%$ e $Pe \rightarrow \infty$. A figura (a) mostra a configuração das partículas no instante inicial enquanto a figura (c) ilustra apenas as configurações dos momentos de dipolo no mesmo instante. Já a figura (b) ilustra a configuração das esferas no instante de tempo $t = 4$ tempos de Stokes e a figura (d) é obtida para o mesmo instante, porém mostra apenas a direção dos momentos de dipolo das esferas.

Após o alinhamento das partículas na direção do campo, a força por interação magnética entre as partículas é a responsável pela tendência de agregação que estas apresentam e que

pode ser observada na figura (5.19). Lembre-se que a força por interação magnética entre os momentos de dipolo das partículas é dada pela equação (5.15). Para simplificar a análise considere que apenas duas partículas estão interagindo magneticamente em um domínio bi-dimensional e que ambas possuem momentos de dipolo iguais alinhados na direção de um campo externo, de modo que:

$$\mathbf{d}_1 = (0, 1) \quad (5.29)$$

$$\mathbf{d}_2 = (0, 1) \quad (5.30)$$

em que os sub-índices 1 e 2 denotam as partículas 1 e 2. A figura (5.21) ilustra o esquema proposto.

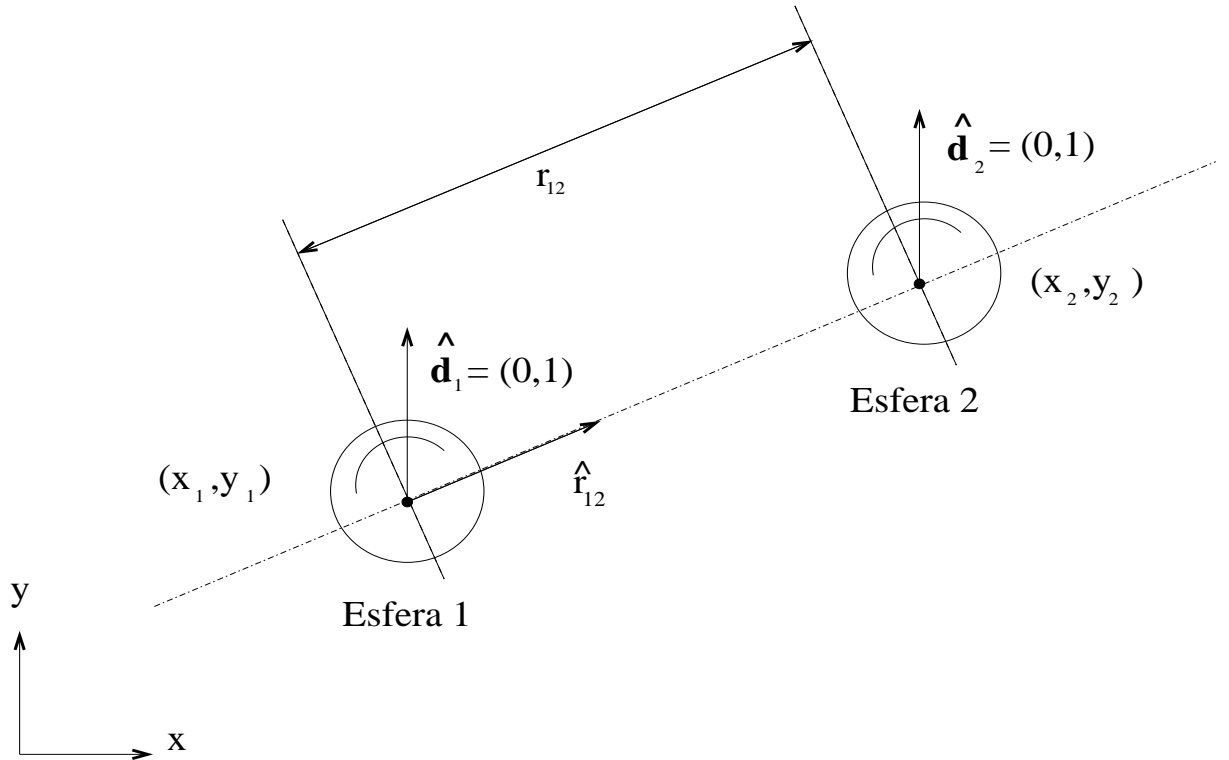


Figura 5.21: Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo.

As forças por interação magnética entre os momentos de dipolo das partículas 1 e 2 são obtidas através da equação (5.15) na condição em que $\mathbf{d}_1 = (0, 1)$, $\mathbf{d}_2 = (0, 1)$ e

$$r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (5.31)$$

$$\hat{r}_{12} = \frac{(x_1 - x_2)}{r_{12}} \hat{e}_x + \frac{(y_1 - y_2)}{r_{12}} \hat{e}_y \quad (5.32)$$

$$\hat{r}_{21} = \frac{(x_2 - x_1)}{r_{12}} \hat{e}_x + \frac{(y_2 - y_1)}{r_{12}} \hat{e}_y \quad (5.33)$$

substituindo os índices 1 e 2 na equação (5.15), têm-se

$$\mathbf{f}_m^1 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} [(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2) \hat{r}_{12} + (\mathbf{d}_1 \cdot \hat{r}_{12}) \mathbf{d}_2 + (\mathbf{d}_2 \cdot \hat{r}_{12}) \mathbf{d}_1 - 5 (\mathbf{d}_1 \cdot \hat{r}_{12}) (\mathbf{d}_2 \cdot \hat{r}_{12}) \hat{r}_{12}] \quad (5.34)$$

e

$$\mathbf{f}_m^2 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} [(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{d}_1) \hat{r}_{21} + (\mathbf{d}_2 \cdot \hat{r}_{21}) \mathbf{d}_1 + (\mathbf{d}_1 \cdot \hat{r}_{21}) \mathbf{d}_2 - 5 (\mathbf{d}_2 \cdot \hat{r}_{21}) (\mathbf{d}_1 \cdot \hat{r}_{21}) \hat{r}_{21}] \quad (5.35)$$

em que \mathbf{f}_m^1 e \mathbf{f}_m^2 denotam as forças magnéticas associadas à interação entre as partículas atuantes nas esferas 1 e 2 respectivamente. Substituindo (5.30) e (5.33) em (5.34) e (5.35) têm-se que as componentes das forças magnéticas atuantes nas esferas 1 e 2 são dadas por

$$f_{m_1}^1 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{(x_1 - x_2)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_1 - y_2)^2 (x_1 - x_2)}{r_{12}^3} \right] \quad (5.36)$$

$$f_{m_2}^1 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{3(y_1 - y_2)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_1 - y_2)^3}{r_{12}^3} \right] \quad (5.37)$$

$$f_{m_1}^2 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{(x_2 - x_1)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_2 - y_1)^2 (x_2 - x_1)}{r_{12}^3} \right] \quad (5.38)$$

e

$$f_{m_2}^2 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{3(y_2 - y_1)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_2 - y_1)^3}{r_{12}^3} \right] \quad (5.39)$$

Desta forma se duas partículas estão alinhadas sobre uma linha central perpendicular ao eixo y, como ilustrada na figura (5.22) das equações (5.36) a (5.39) as forças que atuam nas partículas 1 e 2 são dadas por

$$f_{m_1}^1 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \frac{(x_1 - x_2)}{r_{12}} < 0 \quad (5.40)$$

$$f_{m_2}^1 = 0 \quad (5.41)$$

$$f_{m_1}^2 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \frac{(x_2 - x_1)}{r_{12}} > 0 \quad (5.42)$$

e

$$f_{m_2}^2 = 0 \quad (5.43)$$

ou seja, para esta configuração o efeito líquido das interações magnéticas entre as esferas é o de repulsão na direção x, já que a esfera 1 tenderá a se mover para a esquerda e a esfera 2 para a direita, conforme ilustrado na figura (5.22). Da mesma forma, se estas partículas encontram-se alinhadas sobre uma mesma linha perpendicular ao eixo x, as forças de interação que surgem entre as esferas 1 e 2 são dadas a partir de (5.36),(5.37),(5.38) e (5.39) por

$$f_{m_1}^1 = f_{m_1}^2 = 0 \quad (5.44)$$

$$f_{m_2}^1 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{3(y_1 - y_2)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_1 - y_2)^3}{r_{12}^3} \right] \quad (5.45)$$

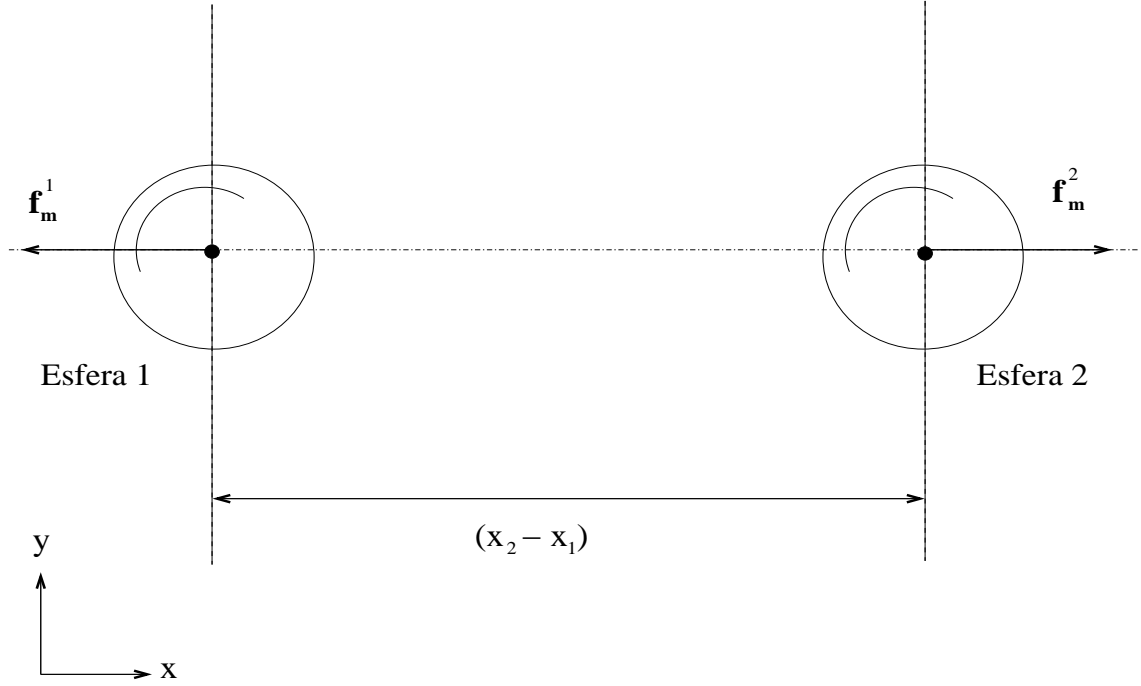


Figura 5.22: Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo e encontram-se alinhadas sobre uma linha perpendicular ao eixo y .

e

$$f_{m_2}^2 = \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} \left[\frac{3(y_2 - y_1)}{r_{12}} - 5 \frac{(y_2 - y_1)^3}{r_{12}^3} \right] \quad (5.46)$$

como neste caso

$$r_{12} = |y_1 - y_2| \quad (5.47)$$

têm-se

$$f_{m_2}^1 = 2 \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} > 0 \quad (5.48)$$

e

$$f_{m_2}^2 = -2 \frac{\alpha^*}{Per_{12}^4} < 0 \quad (5.49)$$

de modo que as partículas irão se atrair na direção do alinhamento entre elas conforme mostra a figura (5.23). Esta breve análise sugere que a dinâmica responsável pela agregação de partículas na aplicação de um campo externo ocorre em duas etapas e gera um efeito líquido de alinhamento das partículas na direção do campo (comportamento clássico observado quando pequenas partículas de material ferromagnético se alinham nas direções das linhas de indução magnética quando aproximadas de um ímã permanente). Primeiramente os momentos de dipolo das partículas são alinhados na direção de um campo externo aplicado devido a um torque de interação entre o campo e as partículas. Em seguida caso exista um espaçamento entre duas partículas quaisquer da suspensão nas direções paralelas ao campo, forças atrativas devido à interação entre os momentos de dipolo magnéticos das partículas surgem na tentativa de aproximar estas partículas para alinhá-las na direção do campo. Paralelamente a isso forças

repulsivas na direção perpendicular ao campo surgem entre essas duas partículas. Além disso conforme as esferas se aproximam outras forças passam a agir entre as partículas como forças repulsivas de lubrificação e forças de contato caso as partículas cheguem a encostar uma na outra.

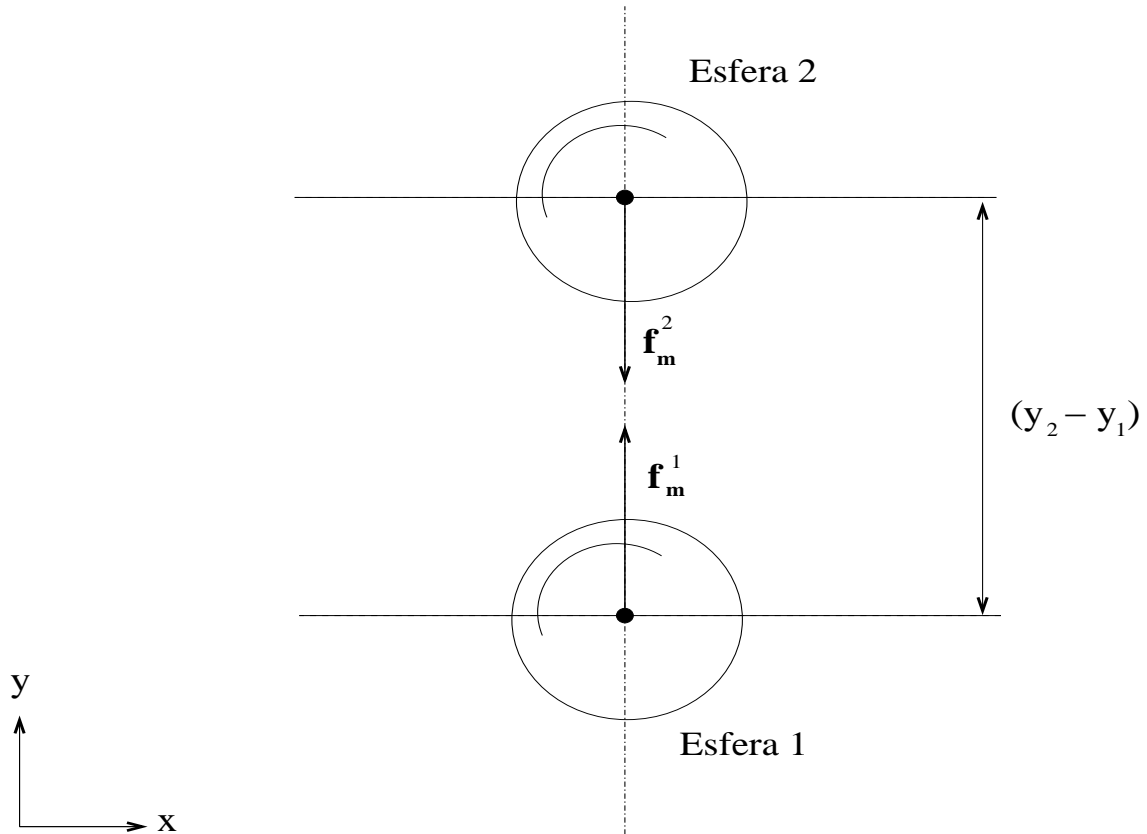


Figura 5.23: Configuração da posição de duas partículas em um sistema bidimensional e dos momentos de dipolo destas na condição em que estas partículas possuem momentos de dipolo alinhados na direção do campo e encontram-se alinhadas sobre uma linha perpendicular ao eixo x .

Essa dinâmica de forças de curto alcance na presença de interações magnéticas e inércia de partícula é muito complicada e do ponto de vista numérico um controle perfeito da intensidade dessas forças no processo de formação de agregados induzidos por interações magnéticas consiste em um grande desafio. Conforme visto em seções anteriores deve-se desligar as forças por interação magnética entre as partículas para partículas muito próximas, procedimento necessário para simulações com inércia de partícula, desta forma a dinâmica passa a ser regida por forças repulsivas artificiais de lubrificação e contato, de modo que a formação de longas cadeias perfeitamente alinhadas na direção do campo passa a ser muito complicada de se capturar numericamente, pois exige um controle muito preciso de todos os parâmetros físicos e forças de curto alcance. Ainda assim a metodologia numérica apresentada na presente Tese consegue capturar esse fenômeno físico e mostra alterações microestruturais consistentes com a anisotropia esperada associada à formação de longas cadeias na direção de um campo aplicado.

Um aspecto interessante que pode ser observado nestas simulações diz respeito à topologia de agregados típicos formados devido ao efeito de interação magnética entre as esferas na presença e ausência de um campo externo. A figura (5.24) ilustra uma ampliação no interior de uma suspensão magnética na ausência de campo magnético, mas na presença de interações entre os momentos de dipolo das partículas. Na figura (a) é possível observar a formação de microagregados em uma forma característica anisotrópica não muito bem definida. Os agregados possuem topologia mais semelhante a de uma esfera ou “cachos” do que a geometria de longas fibras estiradas e os momentos de dipolo das partículas não apontam em uma direção preferencial específica.

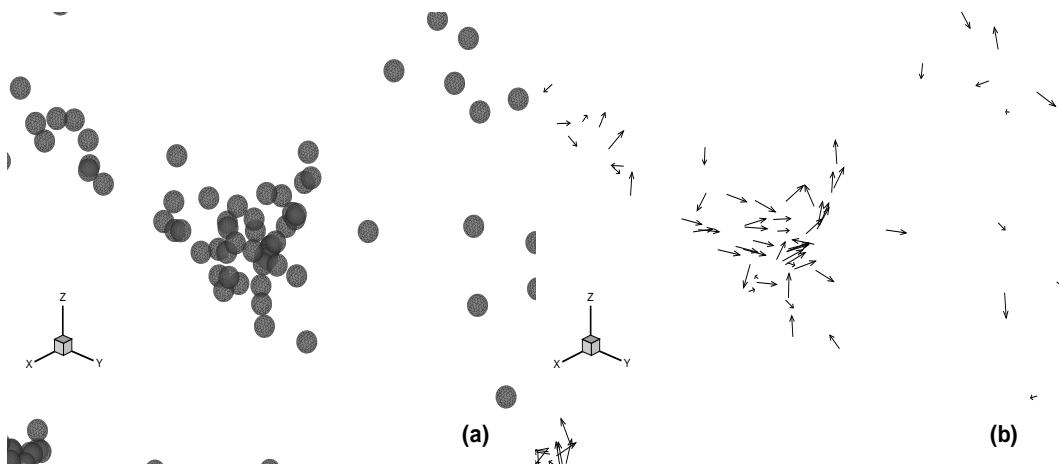


Figura 5.24: Formação de um agregado em uma simulação na presença de interações magnéticas entre as partículas, na ausência de um campo externo. A figura (a) ilustra uma ampliação no interior da suspensão em um agregado qualquer enquanto a figura (b) mostra apenas as setas indicando o momento de dipolo de cada partícula pertencente ao agregado ilustrado na figura (a).

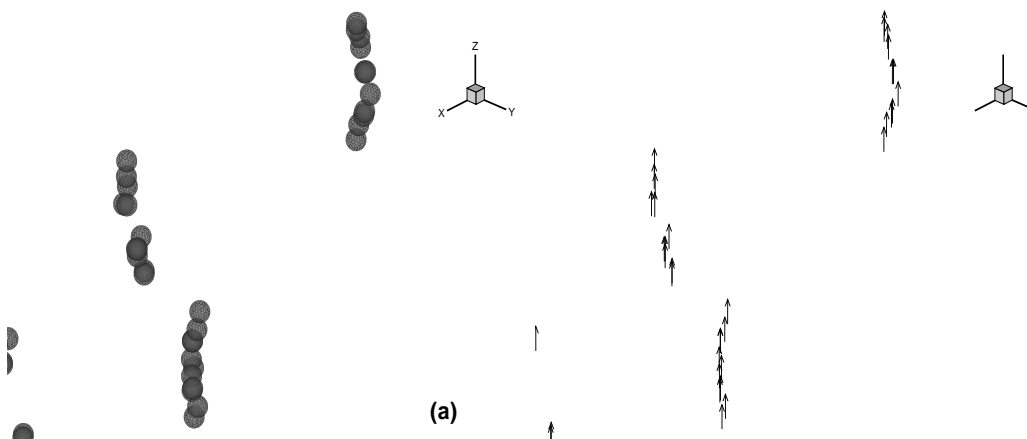


Figura 5.25: Formação de um agregado em uma simulação na presença de interações magnéticas entre as partículas com um campo externo aplicado. A figura (a) ilustra uma ampliação no interior da suspensão em um agregado qualquer enquanto a figura (b) mostra apenas as setas indicando o momento de dipolo de cada partícula pertencente ao agregado ilustrado na figura (a).

Já na figura (5.25), na qual a presença de um campo externo foi considerada, é possível observar longas cadeias alinhadas na direção do campo e momentos de dipolo também alinhados perfeitamente na direção de aplicação do campo externo. A título de curiosidade, um parâmetro interessante, que pode ser explorado em trabalhos futuros relacionados à caracterização de agregados induzidos por efeito de interações magnéticas em sistemas de muitos corpos, é a dimensão fractal do agregado. Este parâmetro é definido pela expressão

$$N_p = \left(\frac{R_A}{a} \right)^d \quad (5.50)$$

em que N_p representa o número de partículas no agregado, R_A é o raio de giração do agregado formado pelo desenho de uma esfera imaginária englobando todas as partículas deste, a é o raio de uma única partícula e d é a dimensão fractal do agregado. A figura (5.26) ilustra um esquema comparativo mostrando a diferença no raio de giração de agregados formados com topologias diferentes.

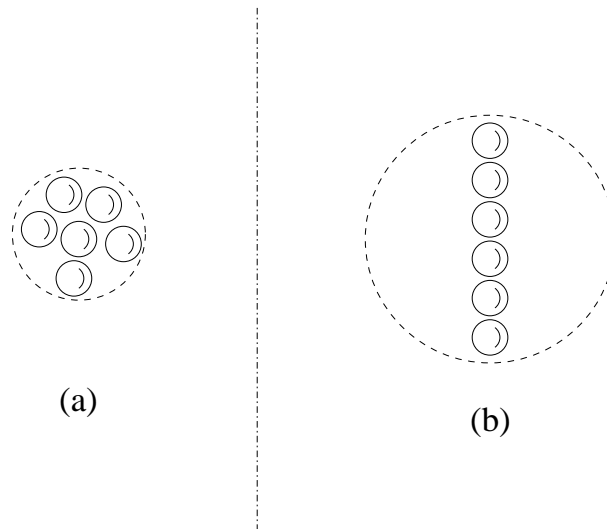


Figura 5.26: Esquema comparativo entre o raio de giração de um agregado com seis partículas agrupadas numa configuração na ausência de campo externo (a) e na presença deste (b).

É possível observar que para um mesmo número de partículas o raio de giração de agregados formados na presença de um campo externo será sempre maior que aqueles formados na ausência deste. Além disso no exemplo dado na figura (5.26) é possível notar que um agregado com 6 partículas organizadas de modo mais próximo a de um círculo, o valor de d será dado por

$$6 = \left(\frac{3}{1} \right)^d \quad \longrightarrow \quad d = 1.63$$

enquanto que na estrutura mostrada em (5.26.b) têm-se

$$6 = \left(\frac{5}{1} \right)^d \quad \longrightarrow \quad d = 1.11$$

dessa forma a tendência geral é que as dimensões fractais de agregados formados em suspensões magnéticas na presença de um campo externo sejam menores que aquelas na ausência de campo.

5.5 Análise das flutuações de velocidade em suspensões magnéticas

As análises preliminares foram importantes para que um processo de simulação possa ser definido na tentativa de obtenção de grandezas físicas com base em simulações diretas na escala da partícula. Desta forma os resultados apresentados daqui para a frente consideram as seguintes condições: 500 partículas por realização, 10 realizações simultâneas e distância da parte ativa com relação às paredes físicas igual a 4 raios de partícula. Considerando estas condições de simulação, procurou-se avaliar o comportamento das flutuações de velocidade induzidas por interações magnéticas em função da fração volumétrica e do parâmetro magnético ψ_m .

Inicialmente fixou-se o valor do parâmetro de interação magnética em $\psi_m = 20.0$, para esta condição a fração volumétrica foi variada entre $0.5\% < \phi < 10.0\%$. Avaliou-se então a variação do comportamento da variância média em função de ϕ . Posteriormente foi definida uma fração volumétrica fixa de $\phi = 5.0\%$ e o parâmetro de interação magnética foi alterado de $10 < \psi_m < 50$. Desta forma foi possível avaliar a influência destas dois parâmetros no comportamento das flutuações de velocidade induzidas por interação entre os momentos de dipolo magnético.

As figuras (5.27) e (5.28) indicam um aumento na intensidade das flutuações de velocidade induzidas por interações magnéticas tanto conforme se aumenta a fração volumétrica quanto se aumenta o parâmetro de interação magnética. Para o aumento com relação ao parâmetro ψ_m este é mais lento no início e no final, existindo uma faixa de variação aproximadamente linear para valores intermediários. O próximo capítulo explora de forma mais detalhada o papel das interações magnéticas na variância de sistemas particulados na presença de interações magnéticas e hidrodinâmicas.

Para a variação das flutuações de velocidade com relação à fração volumétrica de partículas observa-se um aumento muito intenso desta conforme ϕ se aproxima de 10%. Este comportamento indica a tendência de que esta variável cresce de forma descontrolada para maiores frações volumétricas, o que pode ser o indício de um comportamento fisicamente inconsistente, pois conforme se densifica a estrutura da suspensão as partículas possuem menos mobilidade, de modo que poderíamos esperar uma tendência de saturação da variância do sistema para maiores frações volumétricas. Essa possível inconsistência física pode ser explicada pela desconsideração de interações hidrodinâmicas entre as partículas. No próximo capítulo este tópico será novamente explorado, porém na presença de interações hidrodinâmicas e magnéticas simultâneas. É importante falar que mesmo esperando uma atenuação do crescimento da variância do sistema para maiores frações volumétricas devido à diminuição de mobilidade das partículas, as interações magnéticas passam a ficar mais fortes para suspensões

mais densas (maiores valores de ϕ), pois decaem com $1/r^4$ para a força e $1/r^3$ para o torque. Na verdade devido à não linearidade do problema a resposta deve ser buscada através de simulações computacionais na escala da partícula.

Nesta seção nota-se que boas aproximações são obtidas para o ajuste dos valores de saturação temporal de $\langle |\mathbf{u}'|^2 \rangle$ em função de ψ_m e ϕ de acordo com potências inteiras destas variáveis, indo de 1 a 3. No próximo capítulo o comportamento da variância de suspensões magnéticas na presença simultânea de interações magnéticas e hidrodinâmicas será explorado em detalhes e a aparente inconsistência física mostrada no gráfico (5.27) será resolvida.

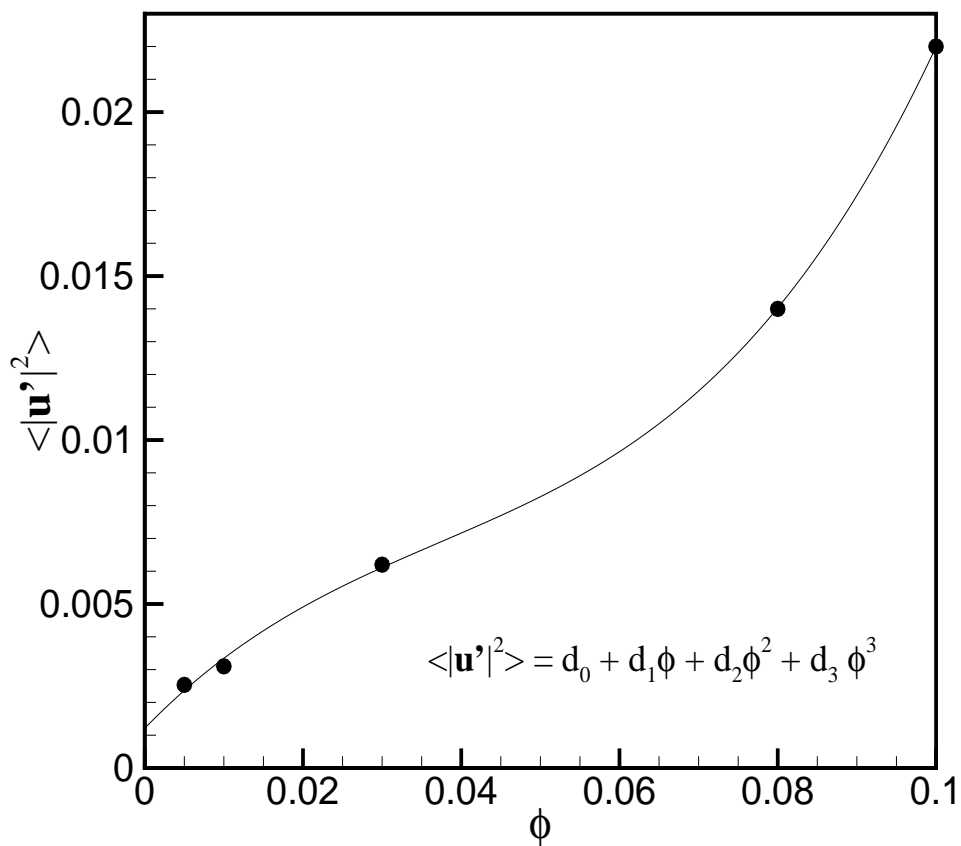


Figura 5.27: Variância em função de ϕ para $\psi_m = 20$

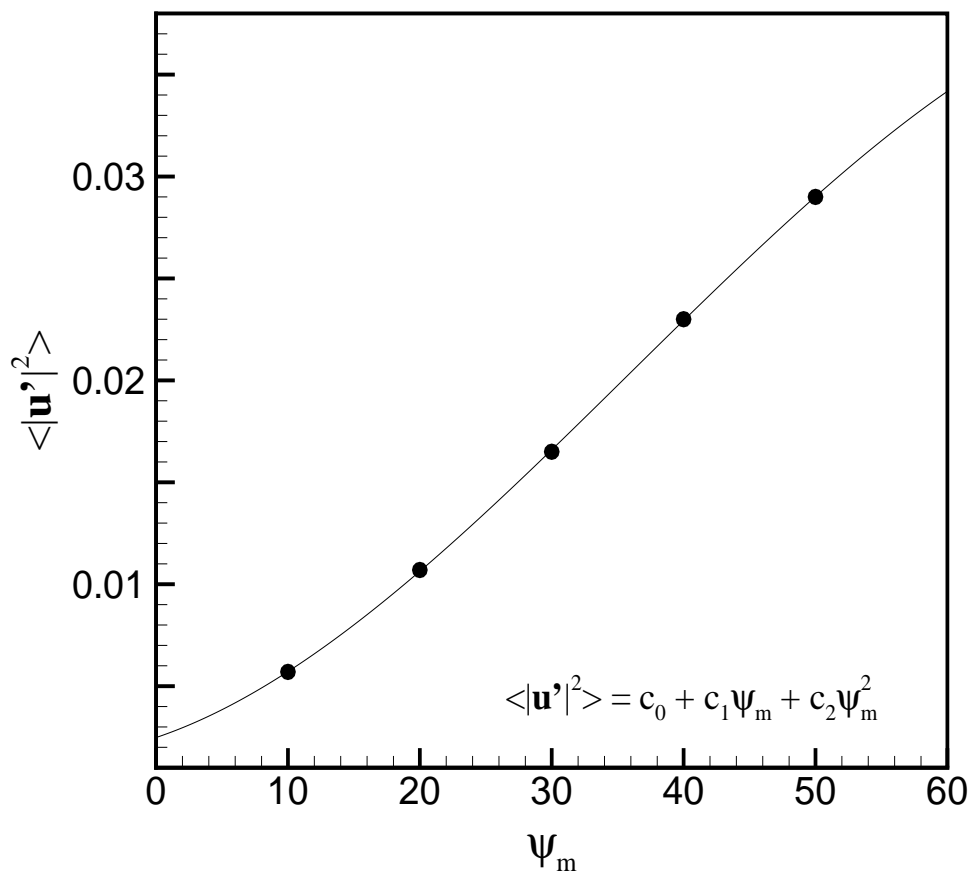


Figura 5.28: Variância em função de ψ_m para $\phi = 5\%$

5.6 Uma análise de modelos de magnetização

Uma das propriedades mais importantes para a caracterização de um ferrofluido consiste na magnetização de equilíbrio da suspensão magnética. A propriedade macroscópica definida por magnetização está intimamente associada à maneira pela qual os momentos de dipolo individuais das nano ou micro partículas que compõe a suspensão se alinham na direção de um campo externo aplicado. A figura (5.29) ilustra o comportamento destes momentos de dipolo na presença de um campo externo. Em um primeiro momento (5.29.a) cada partícula possui um momento de dipolo alinhado em uma determinada direção, de modo que a média das direções dos momentos de dipolo de todas as partículas com relação a uma determinada direção pré-definida é nula. Nesta condição dizemos que a magnetização de equilíbrio (definida para a condição de um ferrofluido em repouso) é nula. Após a aplicação de um campo externo surge de forma espontânea através da interação campo-partícula um torque aplicado sobre cada partícula que compõe a suspensão magnética. Este torque tende a rotacionar as partículas e conseqüentemente seus momentos de dipolo na direção do campo aplicado. Em uma condição em que a razão entre forças magnéticas e brownianas (parâmetro α já definido ao longo do presente texto) é suficientemente grande e o tempo de aplicação do campo externo também, o resultado final é o alinhamento de todos os momentos de dipolo na direção do campo (5.29.b). Nesta condição dizemos que magnetização de equilíbrio da suspensão atinge seu valor de saturação M_s . Nesta condição a magnetização da suspensão consiste simplesmente em uma média volumétrica da magnetização do material sólido que compõe as nano ou micro partículas. Um modelo de magnetização de equilíbrio busca justamente uma equação que

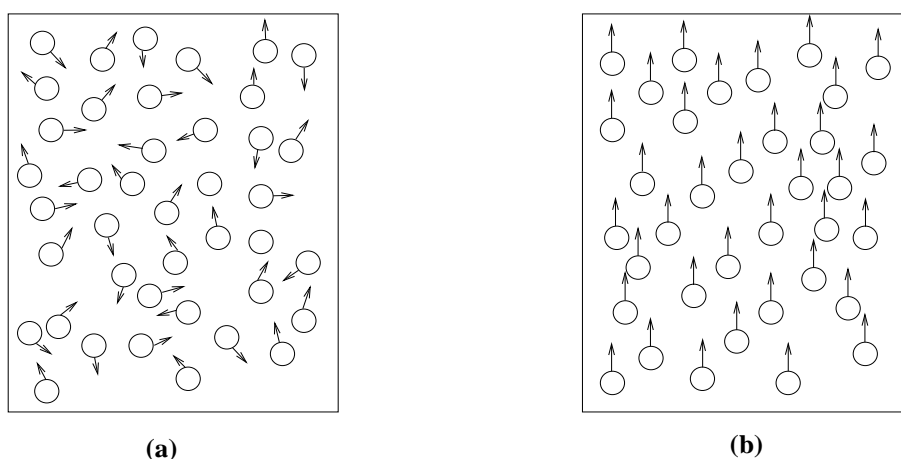


Figura 5.29: Momentos de dipolo distribuídos aleatoriamente (a) e momentos de dipolo alinhados na direção de um campo externo (b)

represente como a magnetização de um ferrofluido em repouso se comporta em função de dois parâmetros fundamentais: a razão entre forças magnéticas e brownianas α e a fração volumétrica de partículas ϕ .

Uma primeira abordagem de um modelo de magnetização de equilíbrio consiste no modelo ordem ϕ baseado na teoria clássica de Langevin. Este modelo despreza interações magnéticas entre partículas. Neste caso é assumida uma função distribuição de probabilidade das orientações dos momentos de dipolo magnético em relação à orientação do campo externo aplicado, como sendo uma função densidade de probabilidade de Boltzmann. Utilizando este modelo, determina-se a magnetização de equilíbrio, como sendo igual a

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_s \left(\coth \alpha - \frac{1}{\alpha} \right) = \mathbf{M}_s L(\alpha), \quad (5.51)$$

em que $L(\alpha)$ é chamada de função Langevin. Nas equações (5.51) e (??), \mathbf{M}_s é a magnetização de saturação definida como o produto entre a magnetização das partículas magnéticas \mathbf{M}_d e a concentração volumétrica de partículas ϕ :

$$\mathbf{M}_s = \phi \mathbf{M}_d. \quad (5.52)$$

A magnetização de equilíbrio do fluido magnético é afetada pela concentração volumétrica de partículas magnéticas ϕ . Note que, para o limite assintótico em que $\alpha \rightarrow 0$ tem-se que:

$$L(\alpha) \rightarrow \frac{\alpha}{3}, \quad (5.53)$$

desse modo, a susceptibilidade χ da solução é constante, independente do campo, e a magnetização para um fluido superparamagnético (na ausência de torques internos no volume microscópico do contínuo, possível apenas em condições nas quais o tensor de tensões do fluido é simétrico) é determinada simplesmente por:

$$\mathbf{M}_0 = \chi \mathbf{H}. \quad (5.54)$$

No caso de α arbitrário:

$$\mathbf{M}_0 = \chi(H, T) \mathbf{H} \quad (5.55)$$

a susceptibilidade é função do campo magnético e da temperatura.

Esta primeira abordagem representa muito bem o comportamento de suspensões magnéticas diluídas. Para condições em que $\alpha \sim 1$ o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ apresenta uma excelente concordância com modelos mais sofisticados para valores de ϕ da ordem de até 6%. Em condições em que $\alpha \gg 1$ todos os modelos teóricos de predição da magnetização entram em colapso independente do valor da fração volumétrica, pois a interação campo-partícula domina a interação partícula-partícula.

Um segundo estudo acerca da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas, realizado por Jansons (1983) propõe uma correção $\mathcal{O}(\phi^2)$ para o modelo de Langevin. Esta correção visa adicionar uma contribuição de efeitos de interação entre pares de partículas no valor da magnetização de equilíbrio da suspensão. A proposta de Jansons (1983) leva a

um modelo no qual a determinação da magnetização de equilíbrio é dada pelo sistema de equações:

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_d L_1(\alpha) \phi + c_0 E_0^2 \mathbf{M}_d L_1(\alpha) \left[\frac{L_1(\alpha) L_2(\alpha)}{\alpha} - \frac{L_2^2(\alpha)}{\alpha L_1(\alpha)} \right] \phi^2 + \mathcal{O}(\phi^3) \quad (5.56)$$

$$L_n(x) = L_{n-2}(x) - \frac{2n-1}{x} L_{n-1}(x), \quad \text{para qualquer } n \in \mathbb{N}$$

$$E_0 = \frac{\varepsilon_0}{K_B T}; c_0 = \frac{2}{5}; L_0(x) = 1; L_1(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}.$$

Um primeiro inconveniente na utilização do modelo proposto por Jansons (1983) consiste no surgimento do parâmetro extra E_0 . Este parâmetro é definido como uma razão entre o parâmetro ε_0 , que representa a energia necessária para separar duas partículas frias de sua configuração de mínima energia (partículas encostadas uma na outra) para uma condição de separação infinita e uma energia associada ao movimento browniano $K_B T$. Este tipo de parâmetro é de difícil obtenção do ponto de vista prático. A presente tese busca realizar um estudo completo acerca dos modelos de magnetização teóricos mais sofisticados disponíveis atualmente. Desde a apresentação do modelo teórico de Jansons em 1983 até o início do século XXI poucos avanços teóricos foram feitos nesta área, até que em um estudo recente de 2001 Kuznetsova e Ivanov e Kuznetsova (2001) apresentaram uma proposta de um modelo de magnetização de equilíbrio $\mathcal{O}(\phi^3)$, que considera interação magnética entre trios de partículas. Este modelo vislumbra aplicações para ferrofluidos densos. O modelo proposto é expresso por:

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_L(\alpha) \left[1 + \frac{4\pi}{3} \frac{d\mathbf{M}_L(\alpha)}{d\alpha} + \frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^2 \mathbf{M}_L(\alpha) \frac{d^2 \mathbf{M}_L(\alpha)}{d\alpha^2} + \frac{(4\pi)^2}{144} \left(\frac{d\mathbf{M}_L(\alpha)}{d\alpha} \right)^2 \right], \quad (5.57)$$

em que $\mathbf{M}_L(\alpha)$ representa o modelo de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$. A expressão (5.57) foi expandida de modo que o modelo final proposto por Ivanov e Kuznetsova (2001) pode ser expressa por:

$$\mathbf{M}_0 = [\mathbf{M}_d L(\alpha)] \phi + \left[\frac{4\pi}{3} \mathbf{M}_d g(\alpha) \right] \phi^2 + \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^2 h(\alpha) + \frac{(4\pi)^2}{144} z(\alpha) \right] \mathbf{M}_d \right\} \phi^3. \quad (5.58)$$

As funções $L(\alpha)$, $g(\alpha)$, $h(\alpha)$ e $z(\alpha)$ são dadas por:

$$L(\alpha) = \coth(\alpha) - \frac{1}{\alpha}; \quad (5.59)$$

$$g(\alpha) = L(\alpha) \left[-\alpha \operatorname{cosech}^2(\alpha) + \frac{1}{\alpha} \right]; \quad (5.60)$$

$$h(\alpha) = L^2(\alpha) \left[2\alpha^2 \coth(\alpha) \operatorname{cosech}^2(\alpha) - \frac{2}{\alpha} \right]; \quad (5.61)$$

$$z(\alpha) = \frac{g^2(\alpha)}{L(\alpha)}. \quad (5.62)$$

Uma comparação das correções $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ do modelo de Ivanov e Kuznetsova (2001) mostra diferentes correções associadas a interação entre pares de partículas. A figura (5.30)

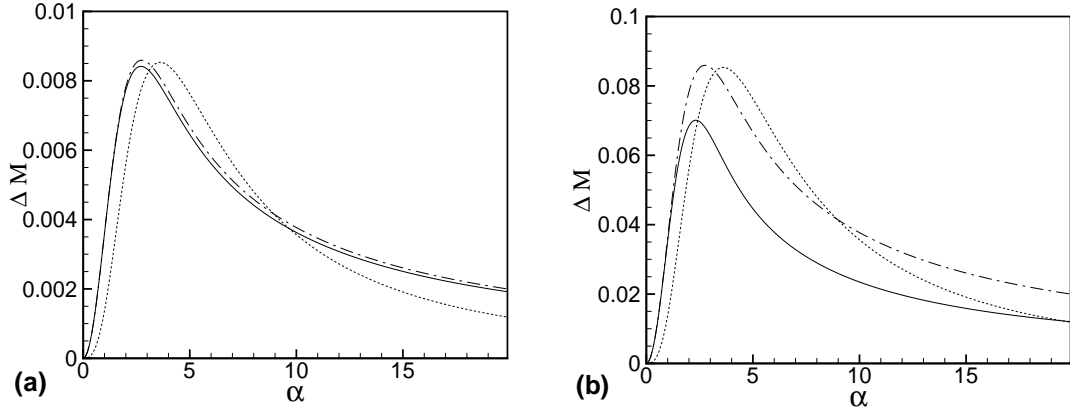


Figura 5.30: Correção dos modelos apresentados. A linha tracejada representa o modelo de Jansons (1983) enquanto a linha traço-ponto denota o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ e a linha contínua o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ ambos de Ivanov e Kuznetsova (2001). Nas figuras (a) $\phi = 1\%$ e (b) $\phi = 10\%$.

ilustra o comportamento da correção dos modelos de Jansons (1983) e Ivanov e Kuznetsova (2001) em relação ao modelo clássico de Langevin em função dos parâmetros α e ϕ .

Os gráficos da figura (5.30) mostram de forma clara uma diferença significativa entre as correções $\mathcal{O}(\phi^2)$ do modelo de Jansons (1983) e do modelo de Ivanov e Kuznetsova (2001). É importante falar que o parâmetro E_0 que surge na expressão (5.57) teve de ser calibrado de modo que seu ponto de máximo coincidissem com o ponto de máximo da correção $\mathcal{O}(\phi^2)$ do modelo de Ivanov e Kuznetsova (2001). O valor de E_0 para que isso ocorresse foi de 13.35. Uma vez calibrado este parâmetro o mesmo se mostrou universal, independente da fração volumétrica de partículas, porém a defasagem observada entre as correções dos modelos $\mathcal{O}(\phi^2)$ apresentados é uma característica intrínseca dos modelos. Enquanto as maiores correções apresentadas pelos modelos de Ivanov e Kuznetsova (2001) ocorrem para valores de $\alpha = 2.8$, as maiores correções do modelo de Jansons (1983) ocorrem quando $\alpha = 3.6$. Com relação à ordem de magnitude das correções propostas é possível observar que a alteração dos valores da magnetização de equilíbrio da suspensão compreende uma faixa que vai de 0.9% à 7% do valor da magnetização do material sólido que compõe as partículas M_d considerando uma faixa de fração volumétrica indo de 1.0% à 10.0% para o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$. As maiores diferenças entre os modelos $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) com relação ao modelo clássico $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin ocorrem para um valor do parâmetro $\alpha = 2.8$, ou seja, para valores de $\alpha \sim 1$ e valores mais altos de ϕ . É possível observar também que conforme o parâmetro α cresce, o modelo de Jansons (1983) é o que mais rápido tende ao modelo de Langevin. Este comportamento é esperado, já que na condição de $\alpha \gg 1$ as interações entre as partículas são dominadas pela interação campo-partícula, de modo que modelos que considerem o efeito de interação devem retornar ao modelo de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$ para $\alpha \gg 1$.

Os modelos de magnetização teóricos existentes na literatura apresentam diferenças significativas entre si. Além disso é possível observar que para valores de ϕ da ordem de 10% o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) passa a gerar correções maiores e relativamente significativas no valor da magnetização quando comparado com a correção $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Este comportamento indica uma divergência na solução assintótica para valores de ϕ desta ordem de magnitude. Do ponto de vista quantitativo a tabela abaixo mostra a diferença percentual entre os modelos ordem ϕ^2 e ϕ^3 de Ivanov e Kuznetsova (2001) em relação a ϕ . Esta tabela tem por objetivo mostrar um indicativo da ordem da fração volumétrica das partículas na qual a solução assintótica passa a apresentar um comportamento divergente.

Tabela 5.1: Diferença percentual para $\alpha = 2.8$ entre as correções $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) para diferentes valores de ϕ .

ϕ (%)	Diferença (%)
1	2,14
2	4,15
3	6,20
4	8,86
5	11,69
6	13,73
7	17,42
8	20,57
9	23,72
10	27,07

É possível notar que para valores de ϕ acima de 5% as diferenças percentuais entre os modelos $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores já ultrapassa 11%, indicando uma divergência na expansão assintótica $\mathcal{O}(\phi^2)$ destes autores. Por esta razão, os gráficos de magnetização com relação a ϕ considerarão apenas a solução assintótica $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) e indo no máximo até 10%, pois não se pode garantir que para valores de $\phi > 10\%$ a solução assintótica estará em sua faixa de validade.

5.6.1 Magnetização em função de α

Os valores numéricos utilizados desta etapa em diante serão comparados com o modelo clássico de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$ e com as correções $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ do modelo de Ivanov e Kuznetsova (2001). A figura (5.31) mostra o comportamento da magnetização de equilíbrio em

função do parâmetro α para uma fração volumétrica $\phi = 10.0\%$, em regime Browniano na condição de $Pe \ll 1$.

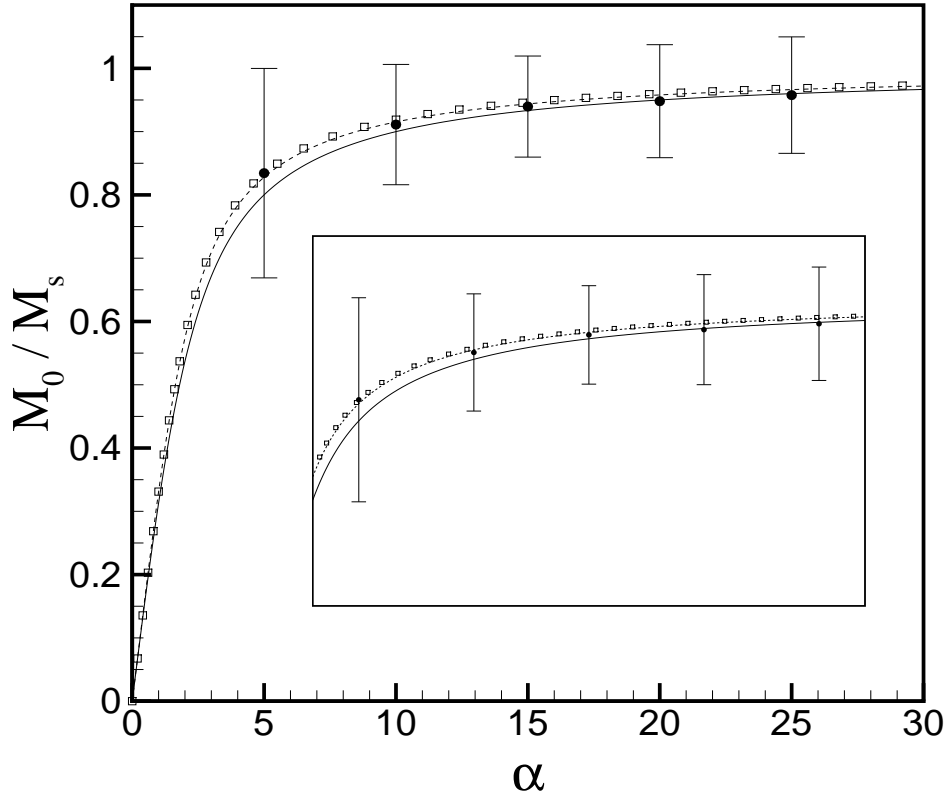


Figura 5.31: Magnetização de equilíbrio em função de α para $\phi = 5.0\%$. A linha contínua denota o modelo $\mathcal{O}(\phi)$ de Langevin, os quadrados vazios representam o modelo $\mathcal{O}(\phi^2)$ de Ivanov et al. (2001) e a linha tracejada o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ dos mesmos autores. Os círculos preenchidos representam os valores numéricos obtidos através da metodologia proposta no presente trabalho. As barras de erro representam o desvio padrão em cima de várias realizações. O encarte mostra um detalhe na comparação entre os valores dos modelos e o valor numérico para $3 < \alpha < 27$.

Nota-se uma grande concordância entre os resultados dos modelos de Langevin, Ivanov e Kuznetsova (2001) e os valores numéricos. É possível observar que todos os modelos tendem ao mesmo valor conforme o parâmetro α cresce. As maiores diferenças entre os modelos teóricos mostrados na figura (5.31) se concentra em regiões em que $\alpha \sim 1$. Desta forma foi feita uma análise do comportamento dos modelos existentes em função da fração volumétrica ϕ para uma condição de $\alpha = 2.8$, pois nesta condição observa-se a maior discrepância entre o comportamento dos modelos $\mathcal{O}(\phi^2)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) com relação ao modelo clássico $\mathcal{O}(\phi)$.

5.6.2 Magnetização em função de ϕ

O gráfico da figura (5.32) ilustra o comportamento observado para a magnetização da suspensão em função da fração volumétrica de partículas para uma suspensão coloidal com $Pe = 0.1$. A figura (5.32.a) mostra boa concordância entre os valores numéricos obtidos com

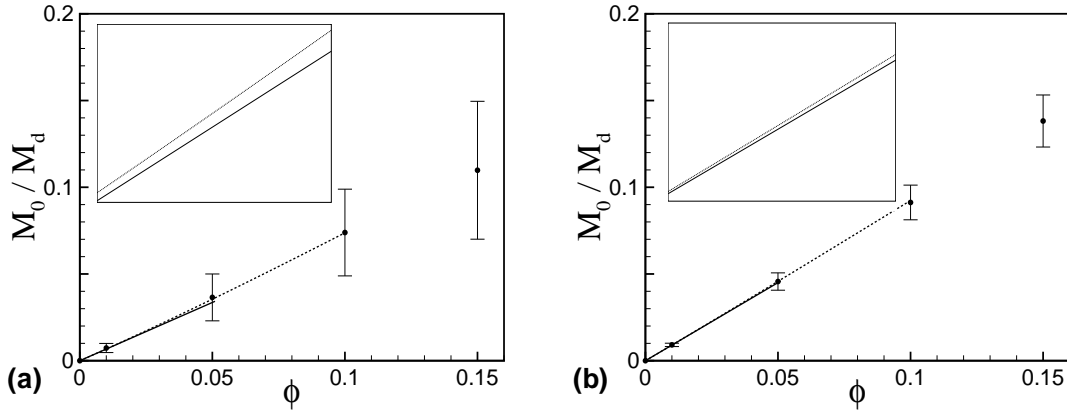


Figura 5.32: Magnetização de equilíbrio em função de ϕ para $\alpha = 3$ (a) e para $\alpha = 10$. A linha contínua representa o modelo clássico de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$, a linha tracejada o modelo $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov et al. (2001) e o círculo preenchido os valores numéricos utilizando a presente metodologia.

a presente metodologia e os modelos tanto de Langevin $\mathcal{O}(\phi)$ quanto o modelo de Ivanov e Kuznetsova (2001) $\mathcal{O}(\phi^3)$. Para $\alpha = 3$ percebe-se uma pequena diferença nas soluções assintóticas $\mathcal{O}(\phi)$ e $\mathcal{O}(\phi^3)$ para valores de ϕ da ordem de 5% (detalhe no encarte da figura). Esta diferença tende a aumentar para maiores valores de ϕ , entretanto, a solução assintótica $\mathcal{O}(\phi)$ foi considerada apenas para $0 < \phi < 5\%$, enquanto a solução $\mathcal{O}(\phi^3)$ para $0 < \phi < 10\%$. É importante termos em mente que soluções assintóticas são obtidas quando um determinado parâmetro tende a zero. Sistemas mais densos, nos quais as interações entre todas as partículas da suspensão são importantes para a dinâmica microestrutural não podem mais ser modelados como sistemas nos quais interações entre pares ou trios dominam, pois a medida que densificamos a suspensão a probabilidade de encontrarmos 4 ou mais partículas em torno de uma partícula teste qualquer aumenta.

Os valores numéricos em todas as situações se aproximam razoavelmente dos modelos teóricos nas faixas de validade destes. É possível notar que as barras de erro dos valores numéricos são significativamente maiores para condições de $\alpha \rightarrow 1$. Isto ocorre porque nestes regimes o comportamento das partículas é fortemente influenciado pelo movimento browniano, tanto no sentido translacional quanto rotacional, de modo que a cada passo de tempo todas as partículas da suspensão apresentam oscilações significativas nos valores de

suas velocidades angulares, que conseqüentemente desorientam continuamente os momentos de dipolo magnéticos de sua orientação preferencial no sentido do campo.

É importante frisar que para frações volumétricas superiores a 10% a correção $\mathcal{O}(\phi^3)$ de Ivanov e Kuznetsova (2001) foi desconsiderada, pois não podemos afirmar com convicção sua faixa de validade para sistemas mais concentrados, desta forma foi considerada apenas a solução numérica para valores de ϕ acima de 10%, já que a presente metodologia considera as interações magnéticas entre todas as partículas da suspensão. É possível notar também que o comportamento das correções nos valores da magnetização da suspensão magnética com relação à fração volumétrica é mais intenso para condições em que o parâmetro α é menor, pois nestes regimes o efeito de interação entre partículas é significativo com relação ao efeito determinístico de orientação de dipolos na direção de um campo aplicado. Para condições de $\alpha \gg 1$ todos os modelos, incluindo os resultados numéricos, entram em colapso, pois a influência determinística do campo supera as interações entre as partículas que se mostram importantes para pequenos valores de α e maiores valores de ϕ .

No próximo capítulo, uma discussão mais profunda acerca do comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão será apresentada considerando a influência do número de Péclet e interações hidrodinâmicas a fim de que se possa propor um modelo de magnetização baseado em simulações computacionais que não seja necessariamente restrito para suspensões coloidais no limite em que $Pe \rightarrow 0$.

5.6.3 Evolução da magnetização ao longo do tempo

A fim de estudar a influência da intensidade do campo aplicado e de flutuações induzidas por movimento Browniano no tempo que uma suspensão magnética coloidal leva para sair de uma configuração inicial não magnetizada até atingir o valor da magnetização limite para a combinação de parâmetros α e Pe , considere o gráfico ilustrado na figura (5.33).

Este gráfico mostra a evolução da magnetização no tempo para um conjunto de 5 realizações utilizando 300 partículas em cada com os seguintes parâmetros: $St = 0.1$, $\alpha^* = \alpha = 10$ e $\phi = 5\%$ para diferentes valores do número de Péclet. A figura (5.33) indica que o aumento no número de Péclet aumenta também o tempo necessário para que a magnetização de equilíbrio da suspensão saia de um valor inicial nulo no qual todos os momentos de dipolo das partículas encontram-se alinhados de forma randômica para um valor final de saturação na qual o alinhamento médio destes na direção do campo atinge um valor constante. Este comportamento ilustra o que já se conhece a respeito de fluidos magnéticos e suspensões magnetoreológicas: o movimento Browniano *retira a memória do fluido*, ou seja,

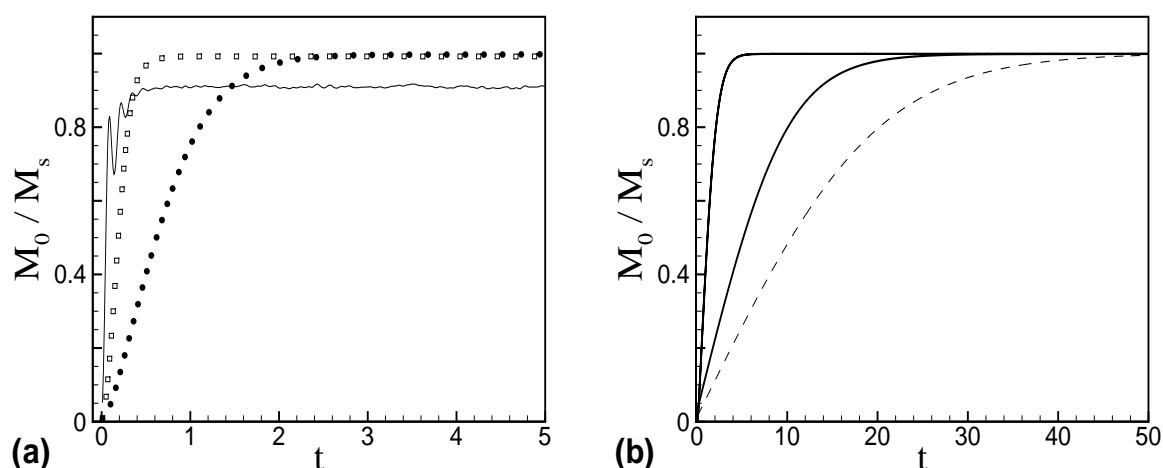


Figura 5.33: Magnetização de equilíbrio em função do tempo para diferentes Péclets. Na figura (a) a linha contínua denota $Pe = 0.1$, o quadrado vazio $Pe = 1$ e o círculo preenchido em preto $Pe = 5$. Para a figura (b) a linha pontilhada representa $Pe = 10$, a linha grossa contínua $Pe = 50$ e a linha tracejada $Pe = 100$.

suspensões magnetoreológicas compostas por partículas que não encontram-se sujeitas ao movimento Browniano demoram mais tempo para serem magnetizadas devido à memória que a suspensão possui o que gera um atraso nas tentativas de alteração de configurações passadas para novas configurações da suspensão. Além disso é possível notar que exceto para Péclets menores que 1, o valor final para o qual a magnetização de equilíbrio da suspensão satura não é alterado pelo valor do número de Péclet.

É importante frisar que o termo *magnetização de equilíbrio* nesta Tese é utilizado para denotar o valor permanente (estacionário) para o qual a magnetização da suspensão na ausência de um escoamento imposto é obtido. A título de ilustração a figura (5.34) mostra duas configurações de dipolo, a primeira no início da simulação na qual estes encontram-se distribuídos de forma randômica e a segunda após a evolução temporal da suspensão na condição de um campo externo aplicado que faz com que os momentos de dipolo das partículas se alinham na direção do campo de forma determinística.

5.6.4 Tempo de relaxação magnética

Através do gráfico (5.33) podemos determinar numericamente o tempo de relaxação magnética em função do número de Péclet. Esta análise é importante no sentido de mostrar a dependência entre escalas de tempo típicas magnéticas e o tamanho da partícula. Osaci et al. (2007) determinaram ordens de magnitude típicas do tempo de relaxação magnética para

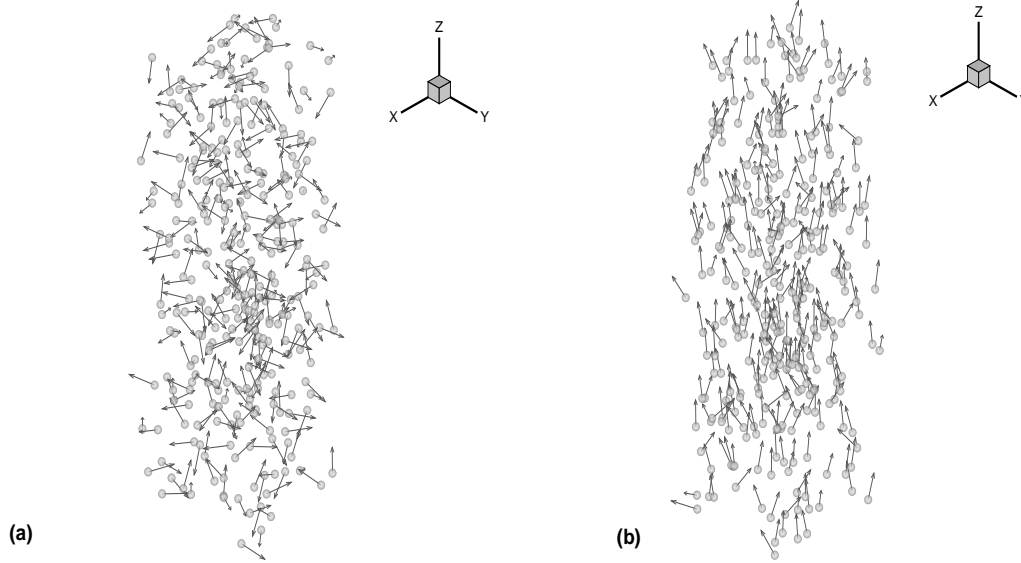


Figura 5.34: Evolução temporal para determinação da magnetização de equilíbrio da suspensão - $Pe = 1$, $\phi = 5.0\%$, $St = 0.1$, $\alpha = \alpha^* = 5$.

suspensões de nanopartículas que em termos práticos costumam ser da ordem 10^{-7} segundos. A temperatura da suspensão e o tamanho das partículas influenciam essa escala de tempo.

Uma maneira de se determinar numericamente o tempo de relaxação magnética, consiste em utilizar a equação fenomenológica de Shliomis (1972) sem o termo de precessão ($\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M}$) e em equilíbrio ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$), dada por

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{1}{\tau_s} (\mathbf{M} - \mathbf{M}_0), \quad (5.63)$$

a solução da equação diferencial ordinária expressa em (5.63) é dada por

$$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{M}_0} = 1 - \exp(-t/\tau_s). \quad (5.64)$$

Através da verificação do melhor ajuste da expressão (5.64) controlando o parâmetro τ_s na captura do comportamento da evolução temporal da magnetização da suspensão até que esta atinja valores de equilíbrio para diferentes números de Péclets pode-se verificar numericamente o comportamento do tempo de relaxação magnética em função do número de Péclet. O gráfico (5.35) mostra os ajustes obtidos através da expressão (5.64) com valores de τ_s calibrados para capturar da melhor forma possível o comportamento numérico. É possível observar um aumento do tempo de relaxação magnética de 0.04 para 0.2 conforme o número de Péclet vai de 0.1 para 1.0. Este comportamento é consistente com o trabalho de Osaci et al. (2007), que mostra um aumento do tempo de relaxação magnética com o diâmetro da partícula.

É interessante notar que existe uma diferença significativa entre o comportamento das curvas teóricas obtidas através da equação fenomenológica de Shliomis (1972) e os valores

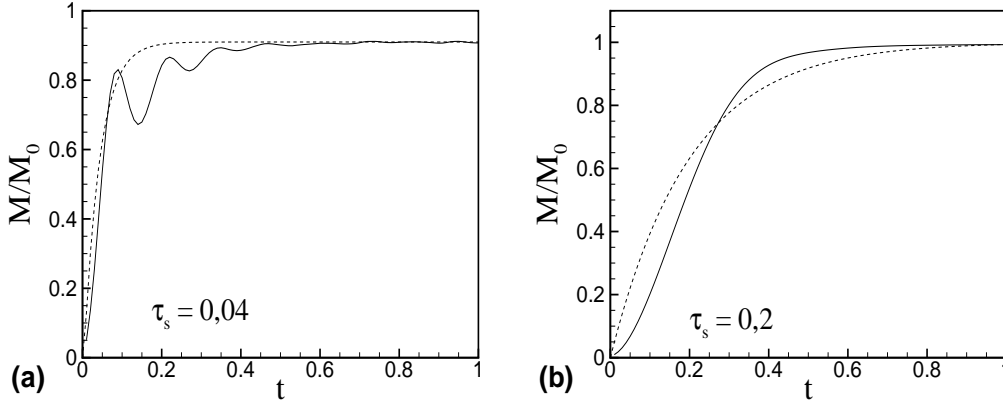


Figura 5.35: Ajuste da evolução temporal da magnetização da suspensão para valores de equilíbrio. A linha tracejada representa o ajuste exponencial e a linha contínua os valores numéricos. Em ambas as figuras têm-se $\phi = 5.0\%$, $St = 0.1$ e $\alpha = \alpha^* = 5$. A figura (a) foi obtida para $Pe = 0.1$ e a figura (b) para $Pe = 1.0$

numéricos. Este desvio pode ser atribuído à desconsideração de efeitos de rotação relacionados ao termo $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M}$ na equação (5.63). Ainda assim a ideia de se propor uma maneira de determinação do tempo de relaxação magnética numericamente através da metodologia proposta é interessante do ponto de vista qualitativo, já que o fenômeno físico da variação do tempo de relaxação magnético relacionado à alterações de parâmetros como a temperatura do fluido e o diâmetro das partículas (através do número de Péclet) pode ser explorado numericamente. É importante frisar que este tipo de análise só pode ser feito para simulações dinâmicas.

5.7 Comentários finais sobre este capítulo

Nesta seção foi possível observar boa concordância entre os valores dos modelos de magnetização presentes na literatura, mais especificamente Langevin e Ivanov et al. (2001), e os valores numéricos obtidos através da presente metodologia. É importante notar que a metodologia utilizada consiste na aplicação direta do método conhecido como *Langevin Dynamics*, que se baseia na solução da equação diferencial ordinária estocástica aplicada a cada partícula da suspensão, computando interações magnéticas entre as partículas diretamente. Outros trabalhos mostram também boa concordância entre valores numéricos e teóricos através da implementação de interações entre as partículas utilizando sistemas com condições de contorno periódicas para interações magnéticas, como no trabalho recente de Wang, Holm e Müller (2003). Na presente seção foi mostrado que o rápido decaimento das interações magnéticas para força ($1/r^4$) e para o torque ($1/r^3$) não gerou problemas de con-

vergência no cálculo da magnetização de equilíbrio da suspensão com relação ao tamanho do sistema, não havendo necessidade imediata do uso de sistemas com condições de contorno periódicas para simular o efeito de uma suspensão infinita, como ocorre no caso de interações hidrodinâmicas por exemplo.

Na próxima seção será abordado o mesmo problema, porém com a inclusão de interações hidrodinâmicas. Neste caso será utilizado um modelo híbrido, desenvolvido na presente Tese, no qual as interações com decaimento lento ($1/r$) serão implementadas através de somas periódicas, enquanto as interações com decaimento mais rápido ($1/r^3$) serão implementados de forma não-periódica.

Capítulo 6 SISTEMAS COM MUITOS CORPOS - PARTE II

6.1 Equações e teoremas fundamentais da Microhidrodinâmica

Como a presente tese procura estudar a dinâmica de partículas micro e nano que compõem suspensões magneto-reológicas e ferrofluidos é importante entender as equações que regem o movimento destas partículas. Esta seção é baseada no livro de Microhidrodinâmica de Kim e Karrila (2005) e nas notas de aula do curso de *Microhidrodinâmica e Escoamentos em Baixos Número de Reynolds* do Prof. Francisco Ricardo Cunha, realizado na Universidade de Brasília no ano de 2010. Maiores detalhes acerca de alguns dos Fundamentos da Microhidrodinâmica utilizados na modelagem do movimento de partículas sujeitas à interações hidrodinâmicas podem ser encontrados no *Apêndice A* desta Tese.

Como as partículas de interesse neste trabalho são muito pequenas e se movem a baixas velocidades em um fluido viscoso, os escoamentos gerados pelos movimentos destas em meio a um fluido ocorrem em baixos números de Reynolds. No limite assintótico em que $Re \ll 1$, as equações governantes do movimento do fluido são as equações de Stokes, dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6.1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad (6.2)$$

para um fluido Newtoniano em regime de escoamento incompressível, a equação constitutiva para o tensor de tensões é expressa por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}, \quad (6.3)$$

em que

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T] \quad (6.4)$$

Assim, a equação do movimento do fluido é dada por

$$-\nabla p + \eta\nabla^2\mathbf{u} = 0, \quad (6.5)$$

é importante notar que na equação (6.5) o termo de força de campo gravitacional não aparece explicitamente, já que o mesmo foi incluído no termo de pressão. Desta forma na equação (6.5) o termo p é dado por:

$$p = p^* - \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{x},$$

em que p^* é a pressão hidrodinâmica, ou pressão mecânica em um ponto qualquer do espaço. As equações (6.1) e (6.5) são conhecidas como as equações de Stokes permanentes. Essas equações diferenciais parciais lineares representam o comportamento de um escoamento no limite assintótico em que $Re \rightarrow 0$. É importante falar que mesmo que uma partícula imersa em um fluido esteja mudando de configuração continuamente é adotada aqui a hipótese de quasi-estacionaridade do *creeping flow*, isto é, a escala de tempo requerida para evolução do campo de velocidades de um estado permanente para outro é muito maior que a escala de tempo para uma mudança na configuração do contorno sólido devido por exemplo ao movimento de uma micro ou nano partícula imersa em um fluido viscoso.

6.1.1 Linearidade das equações de Stokes, reversibilidade hidrodinâmica, problemas de mobilidade e resistência

É importante notar que a principal diferença matemática entre as equações de Stokes permanentes e o sistema de equações que rege o movimento de um fluido com inércia consiste na linearidade da primeira. A principal consequência desta linearidade é que o arrasto ou a magnitude da força hidrodinâmica sobre um corpo ou organismo que se move com velocidade uniforme em um *creeping flow* é diretamente proporcional a velocidade do corpo. Através de uma simples análise de escala da equação (6.5) vemos que:

$$\mathbf{F} \sim \eta \ell \mathbf{u}, \quad (6.6)$$

em que η representa a viscosidade dinâmica do fluido, ℓ é uma escala de comprimento do corpo e \mathbf{u} é uma escala de velocidade do movimento. Esta relação explica o porque do movimento não-linear helicoidal realizado na cauda de um espermatozóide para que este possa se movimentar em um fluido viscoso no regime de *creeping flow*, este movimento é na verdade uma tentativa de quebrar a reversibilidade hidrodinâmica a qual pequenos organismos estão sujeitos quando se movimentam em um fluido em regime de baixo número de Reynolds.

Outra consequência direta da linearidade das equações de Stokes é que o movimento de vários corpos em regime de baixo número de Reynolds pode ser resolvido aplicando-se o princípio da superposição. Deste forma surgem os conceitos de mobilidade e resistência. Para um problema de mobilidade as velocidades de n partículas que interagem hidrodinamicamente podem ser calculadas através das forças que agem sobre as partículas, enquanto que para um problema de resistência as forças hidrodinâmicas sobre as partículas podem ser determinadas em função de suas velocidades. Assim:

$$\mathbf{u}^i = \mathbf{u}_0^i + \sum_{i \neq j} M_{ij} \cdot \mathbf{F}^j(\mathbf{x}_j) \quad (6.7)$$

$$\mathbf{F}^i = \mathbf{F}_0^i + \sum_{i \neq j} \mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{u}^j(\mathbf{x}_j), \quad (6.8)$$

em que \mathbf{M}_{ij} é chamada de matriz mobilidade e \mathbf{R}_{ij} de matriz resistência. A forma destas matrizes é determinada com base na solução fundamental das equações de Stokes.

6.1.2 A solução fundamental

Neste ponto buscamos a solução para o seguinte sistema de equações:

$$-\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} = -\mathbf{F} \delta(\mathbf{x}), \quad (6.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (6.10)$$

Neste caso \mathbf{F} representa a força que um ponto de singularidade realiza sobre o fluido ao se transladar. O operador delta informa que esta força só possui um valor diferente de zero quando $\mathbf{x} = 0$, isto significa dizer que toda a força que uma partícula realiza no fluido se concentra em um ponto e por isto chamamos este ponto de singularidade. Desta forma, temos que:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad \text{para } x \neq 0 \quad (6.11)$$

$$\int_v \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV = -\mathbf{F} \quad \text{para } x = 0 \quad (6.12)$$

O volume que contém o ponto x é na verdade o volume do escoamento no qual existem forças líquidas de superfície, causadas por exemplo pelo movimento de uma partícula que gera forças no fluido. O ponto de partida da solução fundamental das equações de Stokes permanentes consiste na utilização do seguinte par de transformadas de Fourier:

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \mathbf{u}(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}) \quad (6.13)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) dV(\mathbf{k}), \quad (6.14)$$

em que $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k})$ representa o vetor campo de velocidades do escoamento no espaço de número de onda \mathbf{k} e $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ representa o campo vetorial de velocidades no espaço físico tridimensional. Desta forma a equação (6.13) transforma uma função vetorial do espaço livre em um função equivalente do espaço de número de onda, enquanto que a equação (6.14) transforma uma função do espaço de número de onda em uma função do espaço livre. A conveniência do uso das transformadas de Fourier na solução das equações de Stokes está no fato de que termos diferenciais no espaço físico \mathbf{x} , como o operador gradiente, podem ser associados a termos algébricos no espaço de onda \mathbf{k} . Desta forma, temos de acordo com a equação (6.14) que:

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int \nabla \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \right] dV(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} i\mathbf{k} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) dV(\mathbf{k}) \quad (6.15)$$

e

$$\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{3/2} - k^2 \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) dV(\mathbf{k}) \quad (6.16)$$

Assim as seguintes relações entre termos diferenciais no espaço físico e termos algébricos no espaço de onda são estabelecidas:

$$\nabla p = i\mathbf{k}\hat{p}(\mathbf{k}) \quad (6.17)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u} = -k^2 \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \quad (6.18)$$

$$\mathbf{F}\delta(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{3/2} \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{k}), \quad (6.19)$$

as equações de Stokes no espaço de número de onda são dadas então por:

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = 0 \quad (6.20)$$

e

$$-i\mathbf{k}\hat{p}(\mathbf{k}) - k^2\eta\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{3/2}, \quad (6.21)$$

multiplicando a equação (6.21) escalarmente pelo vetor \mathbf{k} e isolando o campo de pressão temos:

$$\hat{p}(\mathbf{k}) = \frac{\hat{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{k}}{ik^2} \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{3/2}, \quad (6.22)$$

note que a equação da continuidade (6.20) foi usada implicitamente no passo anterior. Para sair do espaço de número de onda e retornar ao espaço físico, utiliza-se a equação (6.14), desta forma, após algumas manipulações algébricas, temos que o campo de pressão do escoamento no espaço físico é dado por:

$$p(\mathbf{x}) = \frac{-\mathbf{F}}{8\pi} \cdot \frac{2\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^3}, \quad (6.23)$$

neste caso o vetor \mathbf{x} representa a distância entre um ponto qualquer do fluido e o ponto no qual a singularidade se localiza, neste caso o ponto $\mathbf{0}$. Para uma partícula que gera um distúrbio no campo de velocidades do escoamento localizada em um ponto \mathbf{x}_0 genérico do fluido, temos que o campo de pressão é dado por:

$$p(\mathbf{x}) = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (6.24)$$

em que:

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{1}{8\pi} \frac{2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^3}, \quad (6.25)$$

o vetor \mathbf{P} é chamado de função de Green para o campo de pressão. Substituindo a equação obtida para o campo de pressão no espaço de onda, equação (6.22), na equação de Stokes no mesmo espaço, equação (6.21), após algumas manipulações algébricas e utilizando a equação (6.14) para retornar a solução ao espaço físico, obtemos para o campo de velocidades:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{-\mathbf{F}}{8\pi\mu} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (6.26)$$

em que $\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$ é um tensor de segunda ordem chamado de função de Green para o campo de velocidades ou propagador do distúrbio da singularidade, ou ainda, tensor de Oseen-Burgers. Este tensor é dado por:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \left[\frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} + \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^3} \right]. \quad (6.27)$$

Para o cálculo do tensor de tensões do fluido em termos de uma função de Green correspondente é feito substituindo os resultados para os campos de velocidade e pressão na equação constitutiva de um fluido Newtoniano. Fazendo este cálculo obtemos:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{\mathbf{F}}{8\pi} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0), \quad (6.28)$$

em que $\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$ é um tensor de terceira ordem dado por:

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{6(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^5}. \quad (6.29)$$

A solução fundamental para escoamentos em baixos números de Reynolds, dada pelas equações (6.24), (6.26) e (6.28), fornece o campo de pressão, velocidade e tensão de um escoamento produzido por um ponto de força, ou singularidade, que translada no interior do fluido. Este distúrbio pode ser gerado por exemplo pelo movimento de uma partícula pontual sedimentando em um meio viscoso. Como esta tese tem como objetivo investigar a dinâmica de partículas micro ou nano que interagem hidrodinamicamente, gerando escoamentos de Stokes que podem ser sobrepostos, é importante fundamentar as equações que acoplam o movimento destas partículas, oriundas da solução fundamental somada a alguns teoremas básicos, detalhados nos apêndices deste trabalho.

6.2 Formulação matemática para o problema de muitos corpos com interações hidrodinâmicas

Nesta seção pretende-se considerar para o problema de muitos corpos, abordado na seção anterior, a existência de interações hidrodinâmicas e magnéticas de forma simultânea para investigar a microdinâmica destas suspensões. Para isto será utilizada uma formulação de mobilidade no limite assintótico em que $St \rightarrow 0$. Devido à linearidade das equações de Stokes, temos que

$$\mathbf{U} = \boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \mathbf{F}, \quad (6.30)$$

em que \mathbf{U} representa a velocidade das partícula, $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ é denominada matriz mobilidade e \mathbf{F} representa as forças que atuam nas partículas da suspensão. Através da representação integral das equações de Stokes, descrita em detalhes na fundamentação teórica da presente Tese, é

possível determinar a força exercida por uma esfera α de raio a_α no domínio de um fluido, esta força \mathbf{F}_α é dada pela Lei de Faxén por

$$\mathbf{F}_\alpha = 6\pi\eta a_\alpha \left[\mathbf{U}_\alpha - \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}'(\mathbf{x}_\alpha) \right], \quad (6.31)$$

em que \mathbf{U}_α é a velocidade da partícula α e \mathbf{u}' é o campo de velocidades no qual a partícula está imersa. Neste contexto, o campo de velocidades é resultante do escoamento induzido pelas partículas da suspensão em movimento. Para sistemas diluídos, devido à linearidade das equações de Stokes, é possível aplicar o princípio da superposição para determinar o escoamento induzido em uma posição arbitrário do domínio fluido pelo movimento de cada partícula $\beta \neq \alpha$, este princípio leva a

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{8\pi\eta} \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2 \right) \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\beta) \cdot \mathbf{F}_\beta, \quad (6.32)$$

em que $\mathcal{G}(\mathbf{r})$ é chamado de tensor de Oseen e $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_\beta$, $\mathcal{G}(\mathbf{r})$ é dado por

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \left(\mathbf{I} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right). \quad (6.33)$$

Substituindo a equação (6.32) na equação (6.31) é possível obter a força induzida na esfera α devido ao campo de velocidades induzido por outras esferas β se deslocando na mesma suspensão. Esta equação é dada por

$$\mathbf{F}_\alpha = 6\pi\eta a_\alpha \mathbf{I} \cdot \left[\mathbf{U}_\alpha - \frac{1}{8\pi\eta} \sum_{\beta=1}^N \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2 \right) \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2 \right) \mathcal{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_\beta \right], \quad (6.34)$$

com $\alpha = 1, \dots, N$ e $\mathbf{r} = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha$. Por conveniência pode-se definir o tensor mobilidade de pares $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left(1 + \frac{a_\alpha^2}{6} \nabla^2 \right) \left(1 + \frac{a_\beta^2}{6} \nabla^2 \right) \mathcal{G}(\mathbf{r}), \quad (6.35)$$

este tensor pode ser determinado utilizando uma propriedades fundamental da microhidrodinâmica, dada pela relação $\nabla^2 \nabla^2 \mathcal{G} = \mathbf{0}$, que leva a

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{1}{3r^3} (a_\alpha^2 + a_\beta^2) [\mathbf{I} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\}, \quad (6.36)$$

que na condição de uma suspensão monodispersa (ou seja em que para quaisquer partículas α e β $a_\alpha = a_\beta = a$) recai em

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta} = \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \frac{1}{r} [\mathbf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] + \frac{2}{3r^3} a^2 [\mathbf{I} - 3\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}] \right\}. \quad (6.37)$$

Este tensor é denominado *tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969)* e é utilizado para acoplar o efeito que a força atuante em cada partícula β gera na velocidade de uma partícula α . Este tensor depende apenas da configuração do sistema particulado em dado instante de tempo e possui um decaimento considerado lento em sistemas particulados, ou de longo alcance, que varia com $1/r$. Baseado no desenvolvimento apresentado até o momento, por conveniência pode-se definir dois tensores \mathbf{M}^s e \mathbf{M}^p , denominados tensores automobilidade e mobilidade entre pares respectivamente, dados por

$$M_{\alpha\alpha,ij}^s = \frac{\delta_{ij}}{6\pi\eta a}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (6.38)$$

e

$$M_{\alpha\beta,ij}^p = G_{ij}^{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N \quad \alpha \neq \beta, \quad (6.39)$$

isolando o termo que representa a velocidade da partícula α na expressão (6.34) podemos escrever de forma sintética

$$\mathbf{U}_\alpha = \mathbf{M}^s \cdot \mathbf{F}_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta} \mathbf{M}^p \cdot \mathbf{F}_\beta, \quad (6.40)$$

definindo uma matriz \mathbf{M} chamada de matriz mobilidade global, representando a soma das matrizes automobilidade e mobilidade entre pares, de modo que $\mathbf{M} = \mathbf{M}^s + \mathbf{M}^p$, podemos escrever de forma resumida a equação (6.40) como

$$\mathbf{U} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{F}. \quad (6.41)$$

Muitas vezes a equação (6.41) é escrita em forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{U}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \cdots & \mathbf{M}_{1N} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \cdots & \mathbf{M}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{M}_{N1} & \mathbf{M}_{N2} & \cdots & \mathbf{M}_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_N \end{pmatrix}, \quad (6.42)$$

em que cada termo da matriz apresentada na equação (6.42) é na verdade uma matriz 3×3 . Na equação (6.42) $\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, \dots, \mathbf{U}_N$ são vetores representando as velocidades das partículas 1, 2, \dots , N para uma dada configuração da suspensão. Os elementos diagonais da matriz, ou seja, $\mathbf{M}_{11}, \mathbf{M}_{22}, \dots, \mathbf{M}_{NN}$ são matrizes responsáveis por acoplar o efeito da força atuante em cada partícula α da suspensão na própria velocidade desta. Já os outros termos da matriz

\mathbf{M} representam a influência de cada partícula β sujeita a uma força \mathbf{F}_β na velocidade de uma partícula $\alpha \neq \beta$ na suspensão.

É importante notar que a matriz mobilidade global depende apenas da configuração instantânea da suspensão em determinado instante de tempo. Após a determinação da velocidade de cada partícula as novas posições ocupadas por cada uma na suspensão são determinadas pela equação

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U}, \quad (6.43)$$

em que \mathbf{X} representa o vetor posição de determinada partícula. Para o problema de sedimentação de uma suspensão sujeitas apenas a interações hidrodinâmicas, a força que atua em cada partícula é simplesmente a soma das contribuições da força gravitacional e de uma força repulsiva de curto alcance utilizada para modelar as forças de lubrificação hidrodinâmicas para partículas próximas do contato. Podemos considerar também uma força de contato repulsiva baseada no modelo de Hertz, descrita no modelo anterior, para evitar overlaps de partícula, conforme descrito na seção anterior de modo que

$$\mathbf{F}_\beta = -\frac{4}{3}\pi a^3 \Delta\rho g \hat{\mathbf{e}}_3 + \mathbf{f}_r + \mathbf{f}_c \quad (6.44)$$

no caso em que a suspensão é composta de partículas magnéticas, deve-se considerar também as forças de interação magnética partícula-partícula e partícula-campo externo, de modo que

$$\mathbf{F}_\beta = -\frac{4}{3}\pi a^3 \Delta\rho g \hat{\mathbf{e}}_3 + \mathbf{f}_r + \mathbf{f}_c + \mathbf{f}_m. \quad (6.45)$$

É importante mencionar que a presença de forças magnéticas pode induzir configurações mais atrativas que aumentam a importância da adição de forças repulsivas de lubrificação e de contato a fim de que overlaps de partículas sem sentido físico sejam adicionados à dinâmica da suspensão.

6.2.1 Interações hidrodinâmicas periódicas

A formulação apresentada para a computação de interações hidrodinâmicas em problemas de muitos corpos apesar de fisicamente consistente possui um inconveniente numérico. Como o objetivo do estudo da dinâmica computacional destas suspensões é basicamente a obtenção de propriedades médias da suspensão, como velocidade média de sedimentação, flutuações de velocidade em sedimentação, magnetização de equilíbrio da suspensão, entre outros, devemos considerar um número suficientemente grande de partículas para que as propriedades médias de interesse sejam obtidas a partir de médias estatísticas convergentes, em outras palavras, o

sistema particulado deve possuir um número suficientemente grande de partículas para que a estatística extraída das simulações seja fisicamente consistente e significativa.

Em termos estatísticos estes sistemas são extensivamente grandes com um número de partículas N da ordem de $N \sim 10^{23} - 10^{25}$ partículas. Em termos computacionais este número de partículas envolve uma quantidade de cálculos impraticáveis. Os sistemas utilizados para a computação da física destas suspensões possui geralmente um número de partículas N da ordem de 10^3 . Do ponto de vista estatístico a quantidade de partículas nas proximidades das paredes físicas para sistemas com 10^{23} partículas é pouco significativo com relação ao total de partículas, porém, para sistemas menores os efeitos de parede dominam o comportamento efetivo do sistema. Por este motivo existe um problema clássico de convergência de propriedades estatísticas obtidas em simulações de muitos corpos envolvendo interações com decaimentos lentos, da ordem de $1/r$.

Uma saída para o problema consiste no uso de condições de contornos periódicas. Do ponto de vista numérico o uso de condições de contorno periódicas consiste na maneira mais eficiente de simular o efeito de um sistema infinito, desconsiderando os efeitos de parede nas propriedades médias convergentes da suspensão. Em termos práticos a implementação de um sistema particulado com condições de contorno periódicas considera uma célula central ocupando uma região $\Omega = [0, l_1) \times [0, l_2) \times [0, l_3)$ contendo um número de partículas igual a N . Esta célula central é replicada periodicamente nas três direções do espaço e células chamadas aqui de *células imagens* contendo também N partículas são definidas. Cada uma das N partículas das células imagens interagem com as N partículas da célula central, que na verdade é a única região do espaço com partículas físicas. Em cada instante de tempo a configuração instantânea da suspensão em cada célula imagem é idêntica à configuração da célula central e as condições de contorno das partículas na célula central são periódicas, de modo que uma partícula atravessando a face inferior da célula central reaparece na parte superior do domínio de cálculo através da condição de periodicidade. A figura (6.1) ilustra um exemplo do uso de condições de contorno periódicas em um sistema particulado.

Do ponto de vista matemático a condição de contorno de periodicidade é implementada através do uso de um operador tensorial $\mathbf{P}(l_1, l_2, l_3)$ aplicado ao vetor \mathbf{X}_α , que denota a posição de cada partícula α da suspensão em dada configuração. Nesta notação l_1 , l_2 e l_3 representam os comprimentos de cada aresta da célula central. Este operador \mathbf{P} é definido como

$$P_{ij} = (1 + \varphi_i) \delta_{ij} \quad (6.46)$$

em que

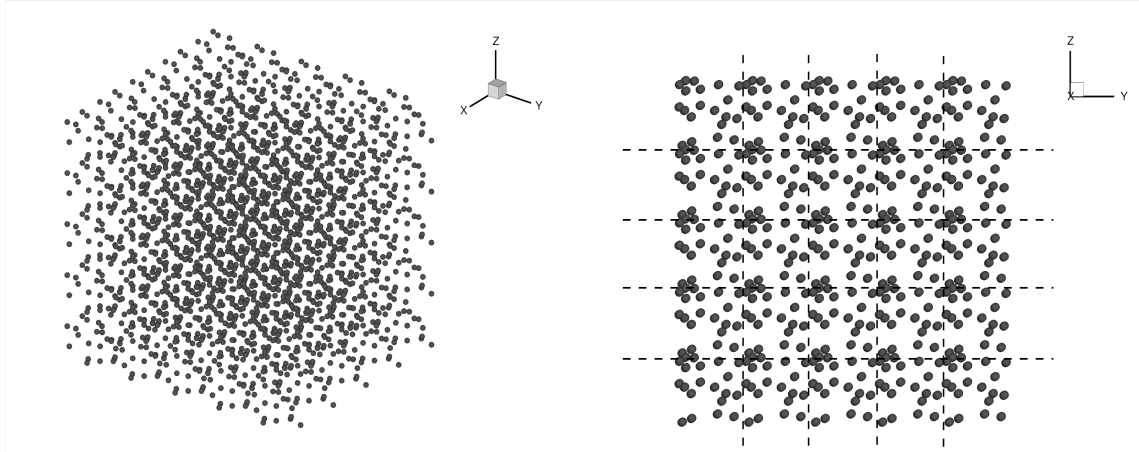


Figura 6.1: Exemplo de um sistema particulado com condições de contorno periódicas. Neste caso a célula central possui apenas 20 partículas com $\phi = 0.15$. Existem 125 células replicadas periodicamente na figura, totalizando 2500 partículas.

$$\varphi_i = \begin{cases} -l_i, & \text{se } x_i > l_i \\ 0, & \text{se } 0 < x_i < l_i, \\ l_i, & \text{se } x_i < 0 \end{cases} \quad i = 1, 2, 3 \quad (6.47)$$

A computação da velocidade de cada partícula α na célula central deve levar em consideração as interações que esta possui com cada partícula β da mesma célula central, além de todas as outras partículas imagens nas células imagens. Esta computação envolve métodos especiais que serão descritos nas seções seguintes.

6.2.2 Criação das células imagens

Conforme descrito anteriormente, a computação de interações com decaimentos lentos em sistemas particulados exige o emprego de condições de contorno periódicas a fim de se evitarem os efeitos de finitude do sistema que introduzem flutuações espúrias sem sentido físico nas médias de propriedades estatísticas da suspensão através da dominância dos efeitos da parede no comportamento dinâmico da suspensão. Para simular o efeito de uma suspensão infinita é necessário a criação de células fictícias periódicas no espaço que irão contribuir na convergência da estatística da suspensão com um número finito de partículas e computacionalmente viável. Do ponto de vista computacional é necessário identificar através de um algoritmo a posição da origem de coordenadas de cada célula e acoplar esta com a posição de todas as partículas imagens, já que a matriz mobilidade global é uma função basicamente da configuração do sistema. De agora em diante as células contendo as partículas da suspensão serão chamadas de *lattices*.

Do ponto de vista geométrico, a mais simples estrutura periódica tridimensional é conhecida como *reticulado de Bravais* e foi utilizada inicialmente para a investigação de propriedades de cristais, por possuírem estruturas geométricas periódicas. Do ponto de vista matemático, podemos definir um reticulado de Bravais, denotado no presente contexto pela letra \mathcal{L} como

$$\mathcal{L} = \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 \gamma_i \mathbf{a}_i, \quad \gamma_i \in \mathbb{Z} \right\} \quad (6.48)$$

em que $\mathbf{a}_i = l_i \hat{\mathbf{e}}_i$ representam os vetores de base do espaço físico cartesiano tridimensional, l_i representam os comprimentos das arestas de cada lattice e $\gamma_i = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ são chamados de índices das lattices e são utilizados para definir o rótulo de cada célula utilizada na criação do reticulado periódico de Bravais, no caso em que $\gamma_i = (0, 0, 0)$ a célula em questão é a lattice central

O uso de sistemas com condições de contorno periódicas exige um tratamento especial à forma da matriz mobilidade global de Rotne-Prager (1969), este tratamento será apresentado na seção seguinte. De qualquer forma, as somas das interações hidrodinâmicas para sistemas com condições de contornos periódicas exige que determinados termos sejam computados no espaço recíproco, ou seja, no espaço do número de onda, este procedimento será necessário para que a convergência das somas sejam mais rápida (tal procedimento será descrito em detalhes na seção seguinte). Com base nesta necessidade, é importante que se crie uma estrutura geométrica periódica também no espaço recíproco, que será chamada no presente contexto de *reticulado recíproco* e denotado pela letra $\hat{\mathcal{L}}$, tal estrutura é definida como

$$\hat{\mathcal{L}} = \left\{ \mathbf{k} : \mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \beta_i \mathbf{b}_i, \quad \beta_i \in \mathbb{Z} \right\}, \quad (6.49)$$

em que \mathbf{k} é o vetor número de onda e $\beta_i = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ são os índices das lattices recíprocas e

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2. \quad (6.50)$$

Na equação (6.50) V representa o volume da célula central, dado por

$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|. \quad (6.51)$$

O uso de condições de contorno periódicas para o estudo de problemas de sedimentação possui vantagens de desvantagens. Como desvantagem pode-se citar o alto custo computacional destas interações, já que cada partícula da célula central deve interagir com todas as partículas da própria célula, além das partículas imagens localizadas em células distribuídas periodicamente no espaço físico e no espaço do número de onda. Toda via, existem alguns métodos interessantes para a diminuição deste custo, conforme será descrito em seções futuras. Como vantagem pode-se citar a ausência de efeitos de parede, o que faz com que todas as partículas da suspensão componham a parte ativa desta do ponto de vista estatístico e a não necessidade de se controlar a taxa de sedimentos que deixam de fazer parte da parte ativa da suspensão na computação das propriedades estatísticas desta. Cabe mencionar também que antes da obtenção de qualquer propriedade média estatística da suspensão é importante que se faça um estudo de convergência destas com o número de lattices utilizadas e com o número de partículas em cada lattice para determinação fração volumétrica de partículas. Na seção seguinte é descrito o tratamento dado ao tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969) para adaptá-lo ao emprego de condições de contorno periódicas.

6.2.3 Mobilidades hidrodinâmicas de Beenakker

O primeiro autor a empregar a técnica das somas de Ewald (1921) para problemas de interações hidrodinâmicas utilizando o tensor de Rotne-Prager (1969) foi Bennakker (1986) em seu trabalho pioneiro. Para ilustrar o método considere inicialmente uma simples soma do tensor $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ sobre o reticulado periódico \mathcal{L}

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}' + \mathbf{x}), \quad (6.52)$$

em que $\mathbf{r}' = (\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta)$ denota a separação entre as partículas α e β no interior da lattice central. Conforme dito anteriormente, estas somas possuem sérios problemas de convergência quando utilizadas na computação de interações físicas com decaimentos lentos, como é o caso de interações hidrodinâmicas. Desta forma aplica-se um tratamento específico para acelerar a convergência da soma expressa em (6.52). Esta técnica foi aplicada por Beenakker (1986) e sua metodologia se inicia com a seguinte representação alternativa do tensor de Rotne-Prager (1969) $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$:

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla\nabla) r, \quad (6.53)$$

é importante mencionar que esta forma de aplicação da equação (6.53) se aplica ao problema de interações hidrodinâmicas em suspensões monodispersas, nas quais $a_\alpha = a_\beta = a$, para suspensões polidispersas o termo $2a_2/3$ seria representado por $(a_\alpha^2 + a_\beta^2)/3$. O tensor $\mathbf{G}^{\alpha\beta}$ pode ser representado como a soma de dois tensores \mathbf{G}^1 e \mathbf{G}^2 como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \mathbf{G}^1(\mathbf{r}) + \mathbf{G}^2(\mathbf{r}), \quad (6.54)$$

em que

$$\mathbf{G}^1(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla\nabla) \{r [1 - \text{erf}(\xi r)]\} \quad (6.55)$$

e

$$\mathbf{G}^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left[1 + \frac{2}{3}a^2\nabla^2 \right] (\nabla^2 \mathbf{I} - \nabla\nabla) \{r \text{erf}(\xi r)\}, \quad (6.56)$$

a função erf que aparece nas equações (6.55) e (6.56) é a função erro, definida como

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (6.57)$$

e ξ é um parâmetro utilizado no presente contexto para controlar a convergência do método, dado por $\xi = \pi^{1/2}V^{-1/3}$. Utilizando estes conceitos, pode-se escrever a mobilidade periódica como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}' + \mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^2(\mathbf{r}' + \mathbf{x}). \quad (6.58)$$

As somas utilizadas na equação (6.58) possuem propriedades diferentes em termos de convergência, enquanto a soma utilizando o tensor \mathbf{G}^1 converge rapidamente no espaço físico, a soma para o termo \mathbf{G}^2 converge mais rápido no espaço recíproco, conforme enfatizado por Beenakker (1986), desta forma faz-se necessário a representação do tensor \mathbf{G}^2 no espaço do número de onda. Para uma dada função $\varphi(\mathbf{x})$ temos que a representação da soma desta no espaço do número de onda é feita através da transformação de Ewald (Born e Huang, 1954) como

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \varphi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}} \hat{\varphi}(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'), \quad (6.59)$$

em que $\hat{\varphi}$ é a transformada de Fourier da função φ dada por

$$\hat{\varphi}(\mathbf{k}) = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \quad (6.60)$$

Desta forma a equação (6.58) pode ser representada em termos de uma soma no espaço físico e outra no espaço recíproco como

$$\mathbf{G}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{L}} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}' + \mathbf{x}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \hat{\mathcal{L}}, \mathbf{k} \neq 0} \mathbf{G}^2(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'). \quad (6.61)$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^1(\mathbf{r}) &= \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \left(\frac{1}{r} + \frac{2a^2}{3r^3} \right) \text{erf}(\xi r) + \left(\frac{16}{3}\xi^7 a^2 r^4 + 4\xi^3 r^2 - \frac{80}{3}\xi^5 a^2 r^2 - 6\xi \right. \right. \\ &+ \left. \frac{56}{3}\xi^3 a^2 + \frac{4}{3}\xi \frac{a^2}{r^2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\xi^2 r^2) \Big\} \mathbf{I} + \frac{1}{8\pi\eta} \left\{ \left(\frac{1}{r} - \frac{2a^2}{r^3} \right) \text{erfc}(\xi r) \right. \\ &+ \left. \left(-\frac{16}{7}\xi^7 a^2 r^4 - 4\xi^3 r^2 + \frac{64}{3}\xi^5 a^2 r^2 + 2\xi - \frac{8}{3}\xi^3 a^2 - 4\xi a^2 - 4\xi \frac{a^2}{r^2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(\xi^2 r^2) \right\} \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}} \\ \mathbf{G}^2(\mathbf{k}) &= \left(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \right) \left(1 - \frac{1}{3}a^2 k^2 \right) \left(1 + \frac{1}{4}\xi^2 k^2 + \frac{1}{8\xi^4} k^4 \right) \frac{1}{\eta k^2} \exp\left(\frac{-k^2}{4\xi^2} \right), \end{aligned} \quad (6.62)$$

em que $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ e $\xi = \pi^{1/2}V^{-1/3}$. Em termos das matrizes mobilidade entre pares \mathbf{M}^p e automobilidade \mathbf{M}^s , temos

$$\mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p = \mathbf{G}_{\alpha,\beta} \quad (6.63)$$

e

$$\mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s = \left(\frac{1}{6\pi\eta a} - \frac{1}{\eta}\xi\pi^{-3/2} + \frac{20}{9\eta}\xi^3\pi^{-3/2}a^2 \right) \mathbf{I}. \quad (6.64)$$

6.3 Formulação completa para sistemas particulados com interações magnéticas e interações hidrodinâmicas periódicas

A formulação final para a solução da evolução dinâmica de uma suspensão magnética com interações hidrodinâmicas e magnéticas, sujeitas à forças de repulsão de curto alcance e forças colisionais de contato, sem inércia de partícula pode ser resumida como

$$\mathbf{U}_\alpha = \mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s \cdot \mathbf{f}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha, \beta=1}^N \mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p \cdot \mathbf{f}_\beta \quad (6.65)$$

com

$$\mathbf{f}_\alpha = \mathbf{f}_\alpha^g + \mathbf{f}_\alpha^r + \mathbf{f}_\alpha^c + \mathbf{f}_\alpha^m + \mathbf{f}_\alpha^b, \quad (6.66)$$

em que \mathbf{f}_α^g é a força gravitacional atuante na partícula α , \mathbf{f}_α^r é a força de repulsão atuando na mesma partícula devido ao efeito de lubrificação quando duas partículas encontram-se próximas do contato, \mathbf{f}_α^c é uma força de contato que passa a atuar quando porventura exista algum tipo de overlap de partícula (pouco utilizada neste problema de mobilidade devido à ausência de inércia de partícula, que facilita o controle do passo de tempo numérico), \mathbf{f}_α^m representa a força por interação magnética atuante em cada partícula α tanto devido ao efeito das partículas $\beta \neq \alpha$ quanto de um campo externo aplicado e \mathbf{f}_α^b representa uma força Browniana atuante na partícula α no caso de suspensões coloidais magnéticas. Estas forças são expressas em suas formas dimensionais por:

$$\mathbf{f}_\alpha^g = -\frac{4}{3}\Delta\rho g a^3 \hat{\mathbf{e}}_3, \quad (6.67)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^r = C_1 (6\pi\eta a) u_0^\alpha e\left(-\frac{\epsilon_{\alpha\beta}}{c^2}\right) \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (6.68)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^c = C_3 E b^{1/2} \epsilon_{\alpha\beta}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (6.69)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^b = 6\pi\eta a \left(\frac{6D_t}{\delta\tau}\right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (6.70)$$

a força de interação magnética é calculada através da computação dentro da lattice central das interações entre todas as partículas α e β por

$$\mathbf{f}_m^\alpha = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{3\mu_0 m_\alpha m_\beta}{4\pi r_{\alpha\beta}^4} [(\mathbf{d}_\alpha \cdot \mathbf{d}_\beta) \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta} + (\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \mathbf{d}_\beta + (\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \mathbf{d}_\alpha - 5(\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta})(\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}] + \mu_0 m_\alpha \mathbf{d}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{H}, \quad (6.71)$$

após a computação da velocidade de cada partícula, sua posição é determinada por $d\mathbf{x}_\alpha/dt = \mathbf{U}_\alpha$. Para o passo de tempo seguinte, é necessário resolver a equação evolutiva do momento angular de cada partícula, para que os momentos de dipolo destas possam evoluir no tempo. Esta variação nos dipolos das partículas influenciam os valores das forças magnéticas na iteração seguinte de modo que o movimento rotacional e translacional de cada partícula passa a estar acoplado com o movimento das outras. A equação do momento angular (balanço de momento angular de acordo com a segunda lei de Newton) para cada partícula, considerando torques magnéticos, brownianos e uma contribuição hidrodinâmica devido a um arrasto viscoso para o torque é dada por

$$\boldsymbol{\omega}_\alpha = \frac{1}{8\pi\eta a^3} (\mathbf{T}_b + \mathbf{T}_m^\alpha), \quad (6.72)$$

com

$$\mathbf{T}_b = 8\pi\eta a^3 \left(\frac{6D_r}{\delta\tau}\right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \quad (6.73)$$

e

$$\mathbf{T}_m^\alpha = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{3\mu_0 m_\alpha m_\beta}{4\pi r_{\alpha\beta}^3} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_\alpha \times \mathbf{d}_\beta) + (\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) (\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \right] + \left[\mu_0 m_\alpha H (\mathbf{d}_\alpha \times \hat{\mathbf{h}}) \right]. \quad (6.74)$$

Após a determinação da velocidade angular de cada partícula, o momento de dipolo desta é determinado por

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{d}^\alpha) = \boldsymbol{\omega}_\alpha \times \mathbf{d}^\alpha, \quad (6.75)$$

que do ponto de vista numérico é resolvida utilizando um esquema explícito de diferenças finitas resultando em

$$\mathbf{d}_{t+\Delta t}^\alpha = \mathbf{d}_t^\alpha + (\boldsymbol{\omega}_\alpha \times \mathbf{d}^\alpha) \Delta t \quad (6.76)$$

6.3.1 Adimensionalização das equações para sistemas particulados com interações hidrodinâmicas e magnéticas

O sistema de equações adimensional, utilizando como escala de tempo um tempo de Stokes, $t_0 = a/U_s$, em que U_s é a velocidade de Stokes e como escala de velocidade a própria velocidade de Stokes, é dado por

$$\mathbf{U}_\alpha = \mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s \cdot \mathbf{f}_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha, \beta=1}^N \mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p \cdot \mathbf{f}_\beta$$

com

$$\mathbf{f}_\alpha = \mathbf{f}_\alpha^g + \mathbf{f}_\alpha^r + \mathbf{f}_\alpha^c + \mathbf{f}_\alpha^m + \mathbf{f}_\alpha^b,$$

neste caso as variáveis encontram-se adimensionalizadas e para fins de simplificar a nomenclatura utilizada, as antigas variáveis dimensionais $\mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s$ e $\mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p$ serão expressas como $\overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\alpha}^s$ e $\overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\beta}^p$, a relação entre $\mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s$ e $\overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\alpha}^s$ e $\mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p$ e $\overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\beta}^p$ é dada por

$$\mathbf{M}_{\alpha,\alpha}^s = 6\pi\eta a \overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\alpha}^s \quad \text{e} \quad \mathbf{M}_{\alpha,\beta}^p = 6\pi\eta a \overline{\mathbf{M}}_{\alpha,\beta}^p, \quad (6.77)$$

as forças $\mathbf{f}_\alpha^g, \mathbf{f}_\alpha^r, \mathbf{f}_\alpha^c, \mathbf{f}_\alpha^m, \mathbf{f}_\alpha^b$ são expressas em suas versões adimensionais por

$$\mathbf{f}_\alpha^g = -\hat{\mathbf{e}}_3, \quad (6.78)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^r = \Lambda^* |\mathbf{u}_\alpha| e^{(-\frac{\epsilon_{\alpha\beta}}{\gamma})} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (6.79)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^c = P_c \epsilon_{\alpha\beta}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (6.80)$$

$$\mathbf{f}_\alpha^b = \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi}, \quad (6.81)$$

e

$$\mathbf{f}_m^\alpha = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{\alpha^*}{Pe r_{\alpha\beta}^4} [(\mathbf{d}_\alpha \cdot \mathbf{d}_\beta) \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta} + (\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \mathbf{d}_\beta + (\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \mathbf{d}_\alpha - 5(\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta})(\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}] + \frac{\alpha}{Pe} \mathbf{d}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{H}. \quad (6.82)$$

Para a equação do momento angular, temos

$$\boldsymbol{\omega}_\alpha = (\mathbf{T}_b + \mathbf{T}_m^\alpha), \quad (6.83)$$

com

$$\mathbf{T}_b = \left(\frac{6}{Pe_r \delta \tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \quad (6.84)$$

e

$$\mathbf{T}_m^\alpha = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{3\alpha^*}{4Pe_r r_{\alpha\beta}^3} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_\alpha \times \mathbf{d}_\beta) + (\mathbf{d}_\beta \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) (\mathbf{d}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{r}}_{\alpha\beta}) \right] + \left[\frac{\alpha}{Pe_r} (\mathbf{d}_\alpha \times \hat{\mathbf{h}}) \right]. \quad (6.85)$$

É importante falar aqui que os mesmos comentários feitos no capítulo anterior com relação à combinação de parâmetros α/Pe e α^*/Pe a conversão destes nos parâmetros ψ_m e φ_m para suspensões não coloidais, nas quais $Pe \rightarrow \infty$, é válida.

6.4 Resultados preliminares sem a presença de interações magnéticas ou campo externo aplicado

A fim de validar a implementação das interações hidrodinâmicas com uso de condições de contorno periódicas alguns testes numéricos preliminares foram feitos. Inicialmente verificou-se em termos quantitativos a importância do uso desta metodologia (condições de contorno periódicas) para que as propriedades médias da suspensão apresentassem comportamento convergente. Em seguida foi verificado como o número de partículas, o número de lattices e o número de realizações influenciam esta estatística e por fim foi verificado o problema clássico de divergência da variância do sistema na presença apenas de interações hidrodinâmicas. Nesta seção inicial todas as simulações foram realizadas para suspensões não coloidais, nas quais $Pe \rightarrow \infty$.

6.4.1 Divergência da velocidade média em sistemas não-periódicos

Para verificar a importância do uso de condições de contorno periódicas foram realizados dois testes de convergência, em ambos a variável estatística analisada foi a velocidade média da suspensão. Inicialmente implementou-se interações hidrodinâmicas não periódicas utilizando apenas o tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969). A figura (6.2.a) ilustra a variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas para uma fração volumétrica fixa ϕ igual a 15%, enquanto a figura (6.2.b) mostra a variação desta mesma propriedade em função da fração volumétrica de partículas para um número fixo de apenas 10 partículas. Em todos os casos foram consideradas

10 realizações. A quantidade de partículas testada foi muito pequena, visto que o objetivo desta análise preliminar era apenas mostrar o sério problema de divergência do uso das mobilidades de Rotne-Prager (1969) não periódicas.

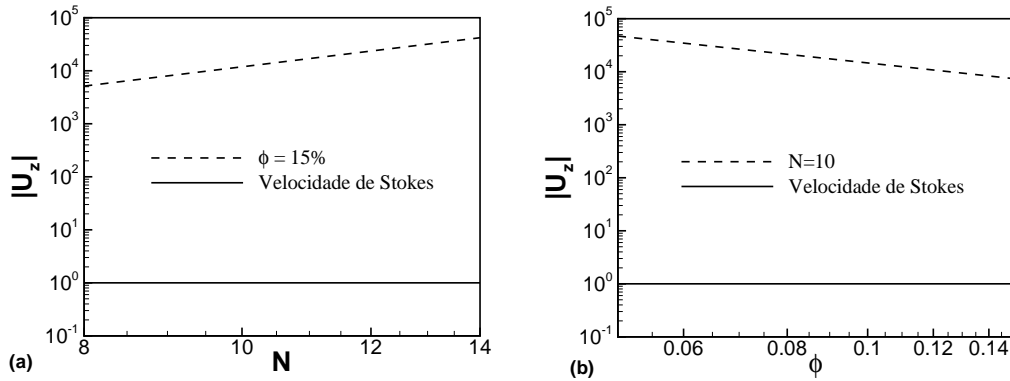


Figura 6.2: Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas (a) e da fração volumétrica de partículas (b) para um sistema não periódico com interações hidrodinâmicas simples utilizando o tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969)

É possível notar uma forte discrepância na ordem de magnitude dos valores da velocidade média em função de valores típicos esperados, dado que estes deveriam ser pelo menos da mesma ordem de magnitude da velocidade de Stokes. É possível notar também que mesmo com a diminuição da velocidade média devido ao efeito *backflow* conforme aumenta-se a fração volumétrica de partículas, os valores médios da velocidade de sedimentação da suspensão continuam completamente fora da ordem de magnitude esperada para o problema. Este teste foi feito apenas com o intuito de checar o problema de divergência da computação das interações hidrodinâmicas não periódicas utilizando o tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969) sem o devido tratamento matemático adaptado para condições de contorno periódicas conforme descrito no presente texto.

6.4.2 Convergência utilizando mobilidades periódicas

A figura (6.3) mostra a convergência desta mesma propriedade em função do número de partículas utilizado na lattice central, agora com o uso de um sistema de condições de contorno periódicas.

É possível notar que conforme o número de partículas aumenta o valor da velocidade

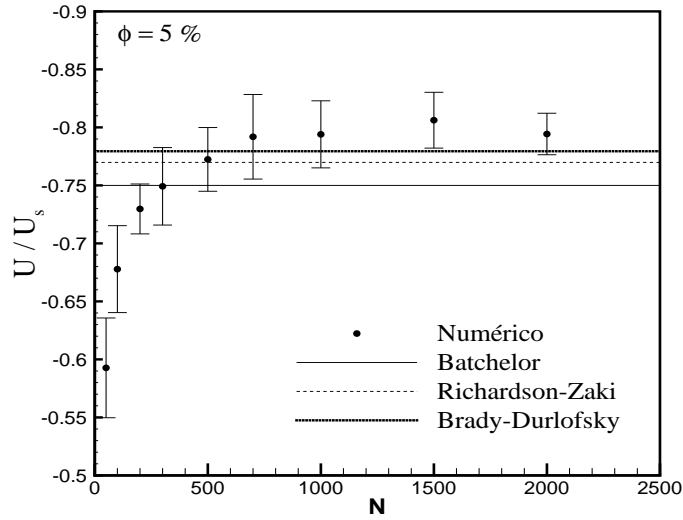


Figura 6.3: Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas para uma fração volumétrica $\phi = 0.05$. Os valores numéricos são comparados com a teoria assintótica de Batchelor (1972) e com as correlações empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988)

médio da suspensão satura para uma faixa de valores da mesma ordem de magnitude das correlações de Richardson-Zaki (1954) e de Brady-Durlofsky (1988). É possível notar também que os valores numéricos se distanciam da teoria assintótica de Batchelor (1972) para regime infinitamente diluído, no qual as partículas não interagem umas com as outras e apenas o efeito do *backflow* é considerado.

6.4.3 Influência do número de realizações e do número de lattices na velocidade média de sedimentação do sistema

A figura (6.4) ilustra a variação desta mesma propriedade com relação ao número de realizações e o conseqüente custo computacional, considerando uma fração volumétrica de partículas igual a 5% e 500 partículas na lattice central. É possível observar que o número de realizações para a velocidade média de sedimentação da suspensão não influencia de forma significativa a estatística, enquanto eleva o custo computacional, dado que este é ordem $O(N_{rea})$.

A figura (6.5) ilustra a variação da velocidade média de sedimentação em função do número de partículas para uma fração volumétrica de 1% para um reticulado de

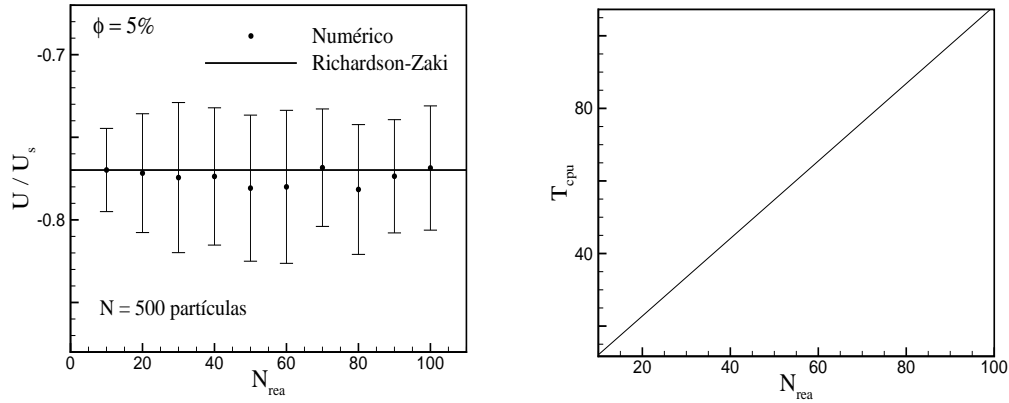


Figura 6.4: Variação da velocidade média da suspensão em função do número de realizações (a) e custo computacional (b)

Bravais com 27 lattices e com 125 lattices, ao lado é possível notar como o número de partículas influencia o custo computacional, $O(N^2)$, para as duas configurações do reticulado de Bravais. É possível notar uma divergência do comportamento do sistema quando apenas 27 lattices são utilizadas, este mesmo problema desaparece com o uso de 125 lattices, apesar de elevar o custo computacional das simulações. Em todas as simulações deste trabalho foram utilizadas 125 lattices na estrutura periódica utilizada.

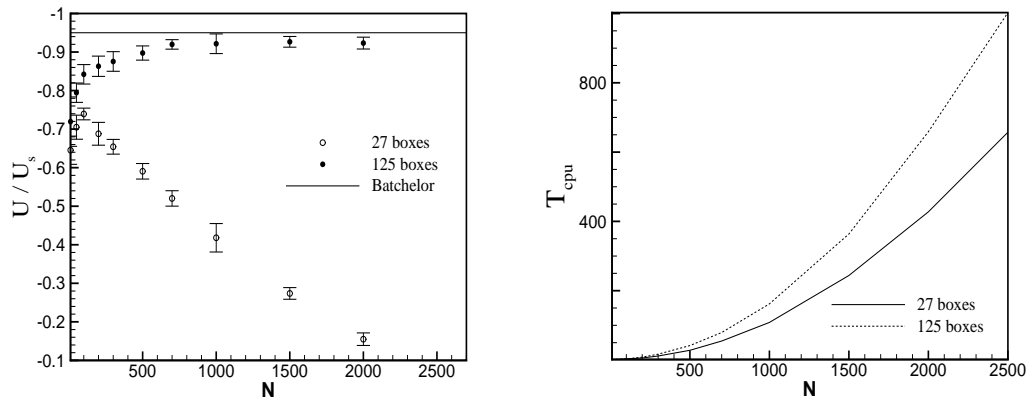


Figura 6.5: Variação da velocidade média da suspensão em função do número de partículas utilizando 27 boxes e 125 boxes (a) e custo computacional em função do número de partículas para 27 e 125 boxes (b)

Note que cada partícula da lattice central deve ter sua velocidade calculada com base em interações que esta realiza com as outras $N - 1$ partículas da mesma lattice e com as outras $(N_{lattices} - 1) \times N$ partículas imagens que se encontram nas outras lattices. Neste contexto em todas as simulações $N_{lattice} = 125$. Desta forma para a determinação da velocidade de cada partícula em uma simulação contendo 500 partículas na lattice

central, são necessários $[499 + (125 \times 500)] = 62.999$ cálculos para cada componente. Como a velocidade é um vetor com 3 componentes, uma para cada direção do espaço, este valor sobre para $62.999 \times 3 = 188.997$. Esse valor se refere apenas ao cálculo da velocidade uma única partícula na lattice central. Para computar a velocidade de todas as partículas são necessários $188.997 \times 500 = 94.498.500$ cálculos.

Além da velocidade translacional de cada partícula é necessário também computar sua velocidade angular a fim de que seus momentos de dipolo possam ser determinados, isto sem contar as interações magnéticas entre as próprias partículas da lattice central, necessárias para a computação de forças e torques por interações magnéticas. Em uma simulação dinâmica estes cálculos devem ser executados a cada passo de tempo e além disso como o objetivo destes cálculos é entender a mecânica destas suspensões com base no comportamento estatístico da suspensão diversas realizações devem ser executadas simultaneamente a fim de que esta estatística possa ser determinada de maneira satisfatória. É possível concluir desta breve análise que o custo computacional destas simulações pode ser extremamente elevado. Uma estimativa simples do número de cálculos necessários N_c para a realização de N_{rea} realizações contendo N partículas distribuídas em um número N_l de lattices formando a estrutura periódica contendo as partículas para $N_{\Delta t}$ passos de tempo pode ser dada por

$$N_c = 3N_{rea}N_{\Delta t}N \{2[(N - 1) + (N_l - 1)N] + 2[N - 1] + 3 + N_{fni}\}, \quad (6.86)$$

em que N_{fni} determina a quantidade de forças e torques que não dependem de interações entre partículas, como forças de contato, repulsivas, browniana, gravitacional, forças magnéticas de interação campo-partícula e torques brownianos e magnéticos por interação campo-partícula, no caso da formulação utilizada esse número é igual a 7. Por exemplo, uma simulação com 2000 partículas, considerando 100 realizações com 2000 passos de tempo e 125 lattices demanda $6,048072 \times 10^{14}$ cálculos, que executados em um processador com frequência de processamento de 1,2 GHz exigiria um tempo de CPU da ordem de 504.006 segundos, ou aproximadamente 140 horas de cálculo ininterruptas. Esta estimativa é na verdade subdimensionada, dado que ainda são necessários cálculos para gerar os números randômicos necessários tanto para a implementação de movimento Browniano quanto para distribuição da posição inicial e dos dipolos iniciais da partículas e mais tempo de CPU é demandado para que o código escreva em arquivos de saída os valores de velocidade, posição e momentos de dipolo de cada partícula em cada realização e em cada passo de tempo, além do custo necessário para que uma

subrotina de pós processamento possa realizar toda a análise estatística necessária, que também pode ser consideravelmente cara.

As figuras (6.7) e (6.8) mostram exemplos de uma estrutura periódica típica utilizada nas simulações. Enquanto a figura (6.7) ilustra o aspecto de uma suspensão vista de fora, a figura (6.8) fornece uma ilustração de uma ampliação no interior desta estrutura.

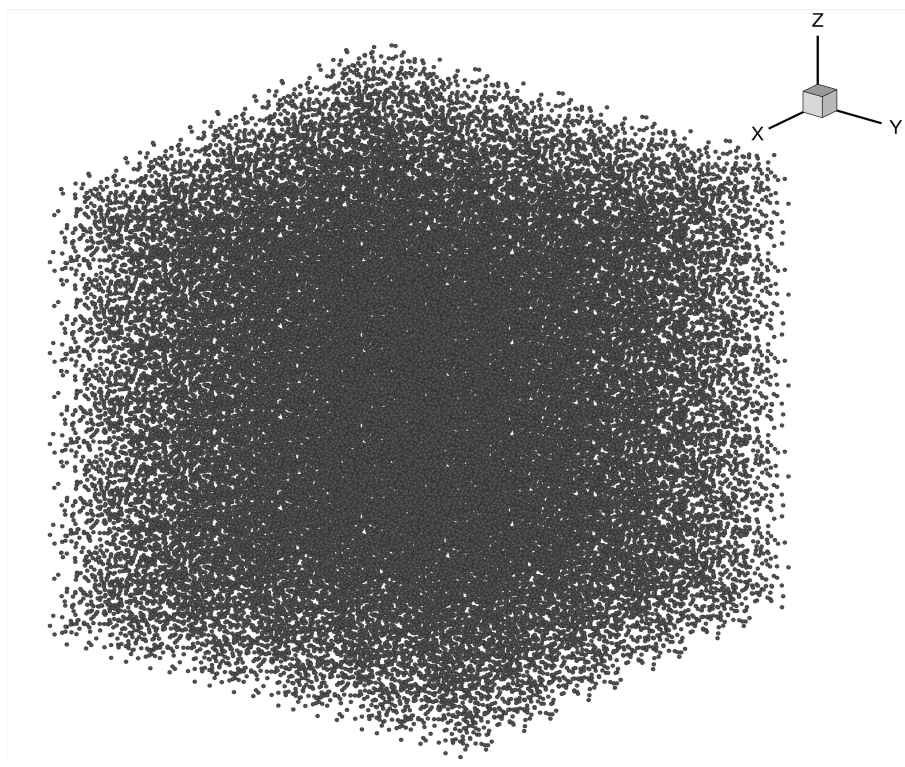


Figura 6.6: Exemplo de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$

Do ponto de vista físico todo o reticulado contendo estas partículas pode não passar de um volume infinitesimal do contínuo contendo por exemplo nano-partículas magnéticas ou de um volume sensitivo um pouco maior para o caso de suspensões não coloidais com partículas micrométricas. De qualquer forma toda esta micromecânica intrincada e não linear é responsável pelos valores de importantes propriedades médias da suspensão como a velocidade média desta, pressão e viscosidade de partículas (associadas com as flutuações de velocidade do sistema) e no caso de uma suspensão magnética, a própria magnetização da suspensão.

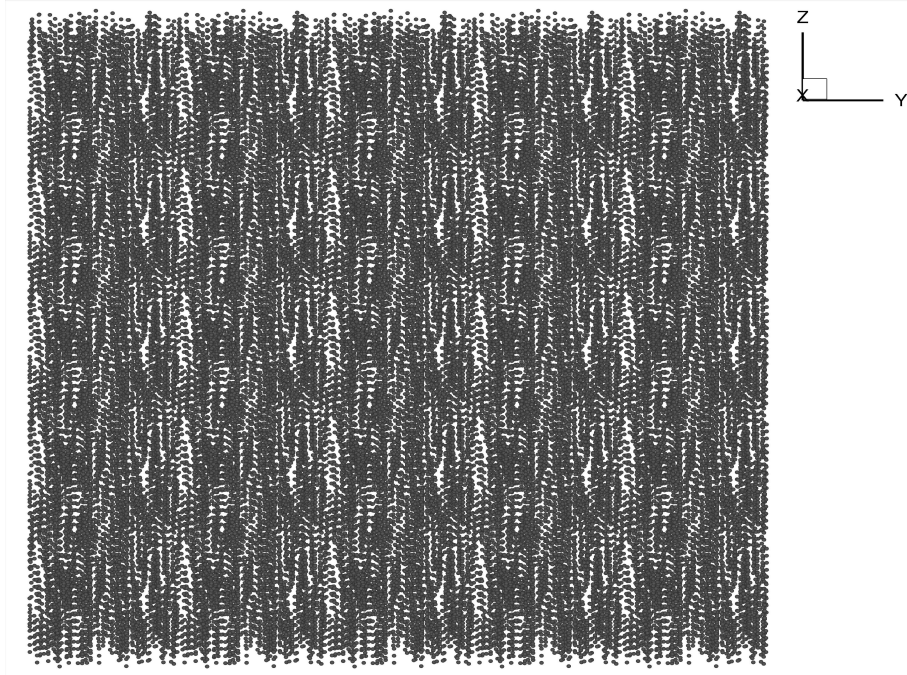


Figura 6.7: Exemplo de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$ vista de lado, no qual é possível notar a periodicidade da estrutura

6.4.4 Divergência da variância para um sistema apenas com interações hidrodinâmicas

Apesar da formulação de mobilidades periódicas solucionar o problema da divergência da velocidade média do sistema devido à computação de interações hidrodinâmicas de longo alcance com decaimento lento em sistemas particulados finitos, existe um problema clássico de convergência da variância deste sistema. Do ponto de vista estatístico a variância de um sistema particulado pode ser definida por

$$\langle v'^2 \rangle_{\alpha}(j, t) = [v_{\alpha}(j, t) - \bar{v}(j, t)]^2, \quad (6.87)$$

o índice inferior i denota uma partícula i pertencente àquela realização α . A barra superior é utilizada para definir a velocidade média da suspensão em uma realização em dado instante de tempo. Nesse caso $v_{\alpha}(j, t)$ representa a velocidade de uma partícula α e uma realização j em dado instante de tempo t , enquanto $\bar{v}(j, t)$ denota a velocidade média do sistema particulado em uma dada realização j e tempo t , calculada por

$$\bar{v}(j, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N v_{\alpha}(j, t). \quad (6.88)$$

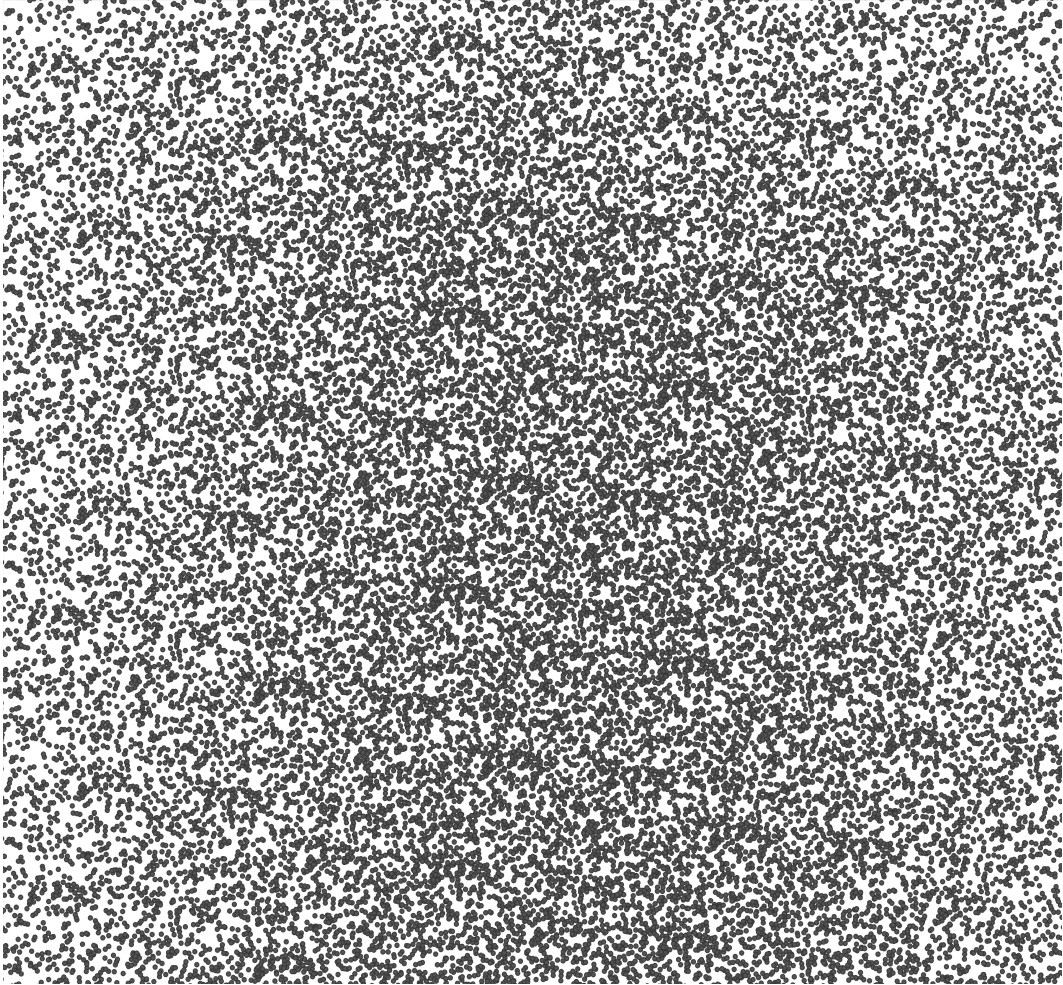


Figura 6.8: Ampliação no interior de uma estrutura periódica contendo 125 lattices, 500 partículas na lattice central, 62500 partículas no total com uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.12$

A variância média de cada realização é calculada por

$$\langle v'^2 \rangle (t) = \frac{1}{N_{rea}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N_{rea}} \sum_{\alpha=1}^N \langle v'^2 \rangle_{\alpha} (j, t). \quad (6.89)$$

O problema da divergência da variância em simulações de muitos corpos interagindo hidrodinamicamente utilizando formulação de condições de contorno periódicas é um problema antigo e ainda não foi resolvido. Muitos trabalhos mostram a divergência desta propriedade estatística em simulações computacionais, como Caffisch e Luke (1985) e Cunha, Abade, Souza e Hinch (2002). Neste último trabalho Cuha et al. (2002) mostraram que para suspensões bidispersas a variância do sistema é mais dependente do tamanho do sistema quando comparada com suspensões monodispersas, nas quais foi possível obter uma convergência da variância para frações volumétricas da ordem de 20%.

O estudo da divergência da variância de uma suspensão sujeita apenas a interações hidrodinâmicas tem sido tema de diversos estudos experimentais, dentre os quais pode-se citar Nicolai e Guazzelli (1995), Segre et al. (1997) e Bergougnoux (2003), além de estudos teóricos, como Koch e Shaqfeh (1991), Luke (2000), Mucha e Brenner (2003) e Felderhof (2005), além de estudos baseados em simulações computacionais, como o já citado trabalho de Cunha et al. (2002), além dos trabalhos de Ladd (2002) e Nguyen et al. (2004).

Uma das hipóteses para esta divergência está associada ao fato de que conforme aumentamos o tamanho do sistema para uma dada fração volumétrica de partículas (o problema é mais crítico no caso de suspensões monodispersas em regimes mais diluídos) independente da quantidade de partículas consideradas na suspensão, a configuração espacial da suspensão permanece sempre randômica, dado que estas interações não são capazes de gerar de forma espontânea vazios em determinadas regiões da suspensão. Esta teoria é interessante, pois de acordo com os cálculos teóricos de Luke e Caffisch (1985) para uma suspensão de esferas distribuídas randomicamente através de um cálculo simples e direto os autores mostram a dependência da variância com o tamanho do sistema, entretanto em estudos experimentais como Nicolai e Guazzelli (1995) os autores obtiveram um valor de saturação da variância para sistemas suficientemente grandes. De fato em termos experimentais é muito difícil a geração de distribuições perfeitamente randômicas em cima de várias realizações, pois em uma suspensão com N esferas distribuídas em um recipiente físico, espera-se que em cada metade deste o número de esferas seja igual a $N/2 \pm \sqrt{N}$, como ilustra a figura (6.9). Deste modo a própria geração da condição inicial em laboratório tende a ter um pequeno desvio de uma configuração perfeitamente randômica, como se obtém em estudos computacionais.

Em experimentos realizados em laboratório é praticamente impossível gerar uma configuração espacial totalmente randômica e qualquer pequeno excesso ou falta de partículas em determinada região da suspensão é capaz de gerar correntes convectivas no interior desta, que levam à uma medição convergente da variância do sistema para um número suficientemente grande de partículas. A figura (6.10) ilustra o resultado de diversos testes numéricos no qual é possível observar a divergência da variância do sistema em função do número de partículas deste para uma fração volumétrica de partículas fixa e igual a 5%. É possível observar que conforme o tamanho do sistema aumenta a variância deste também aumenta e não atinge um patamar estável representando um limite de saturação desta variável estatística. Para que o número de partículas da suspensão aumente com uma fração volumétrica fixa as dimensões da

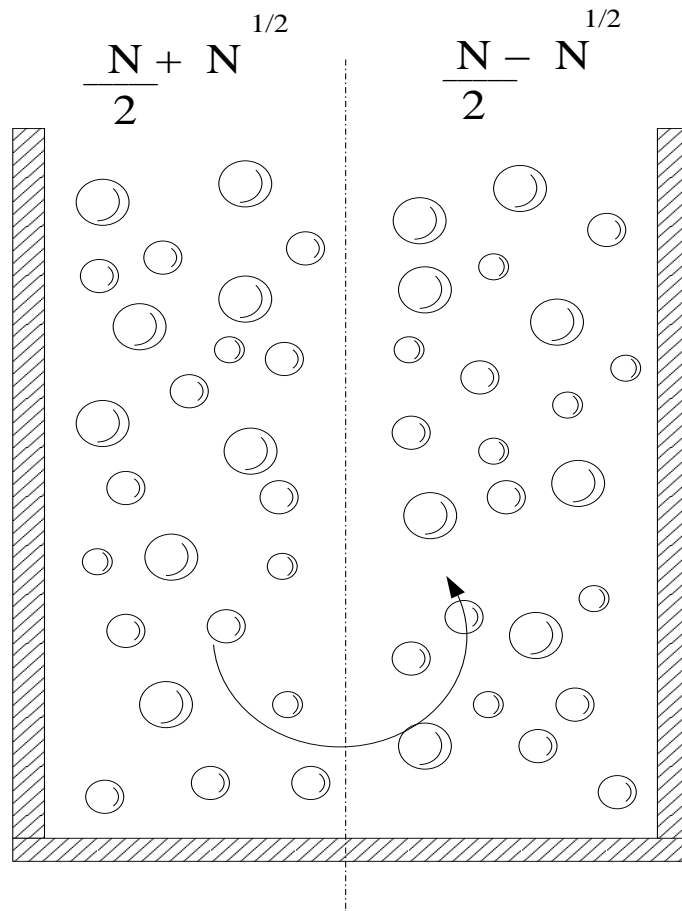


Figura 6.9: Geração de condições iniciais em laboratório com ligeiros desvios de uma condição totalmente randômica. Neste caso o déficit de partículas em determinado lado do recipiente induz o surgimento de correntes convectivas na suspensão, que podem induzir flutuações extras de velocidade maiores que àquelas flutuações estatísticas induzidas apenas por interações hidrodinâmicas levando a um comportamento em laboratório convergente da variância do sistema.

lattice são aumentadas.

Um mecanismo físico que em tese seria capaz de quebrar a randomicidade da distribuição espacial das partículas na suspensão seria a existência de interações magnéticas, capazes de formar vazios e microagregados no interior da suspensão. No presente trabalho a influência de interações magnéticas é avaliada como um mecanismo físico capaz de solucionar o problema clássico de divergência da variância em sistemas com interações hidrodinâmicas, conforme será discutido em seções posteriores.

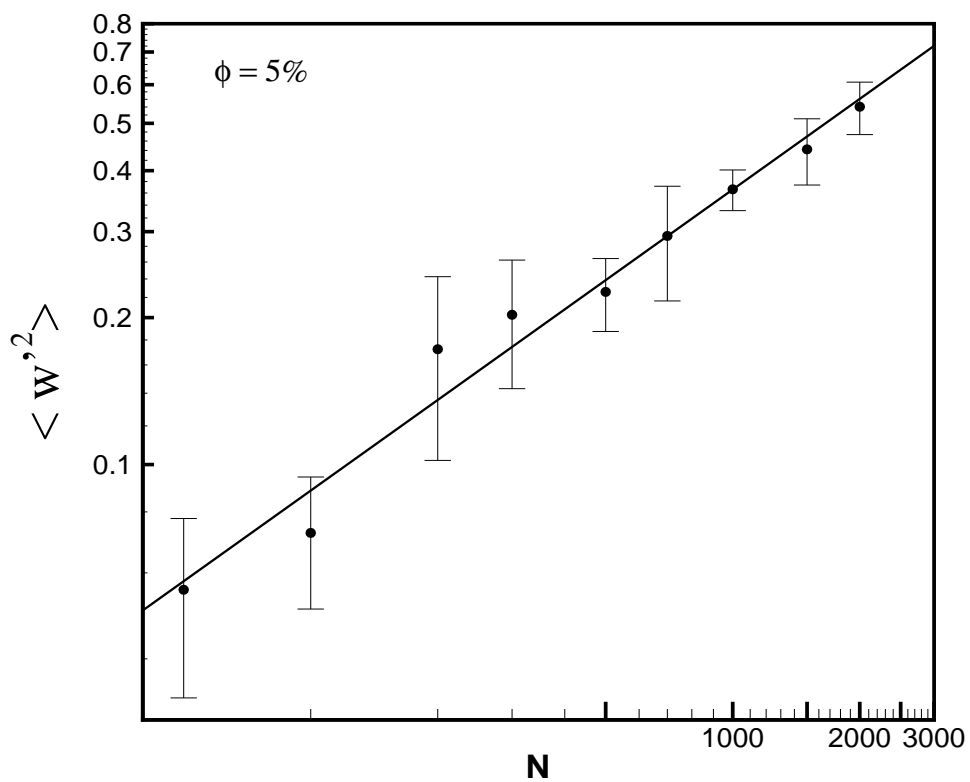


Figura 6.10: Divergência da variância com o tamanho do sistema para uma suspensão com fração volumétrica de partículas igual a $\phi = 0.05$

6.4.5 Velocidade média de sedimentação

O primeiro teste importante de validação da implementação de interações hidrodinâmicas periódicas consiste em avaliar o comportamento da velocidade média de sedimentação da suspensão em função da fração volumétrica de partículas. Ao se observar o comportamento de sedimentação de uma suspensão de partículas rígidas em um fluido Newtoniano é possível observar, devido à alta não linearidade destas interações, que enquanto a maioria das partículas se movimenta na mesma direção da aceleração da gravidade, algumas partículas se movimentam em sentido ascendente e outras sedimentam com velocidades inferiores a da velocidade de Stokes. Além disso, pelo fato das partículas tenderem a se movimentar em sentido descendente, estas acabam deslocando uma certa massa de fluido para baixo. Esta massa de fluido deslocada atinge o fundo do recipiente físico contendo as partículas e retorna em sentido ascendente empurrando as partículas para cima e retardando ainda mais a velocidade média de sedimentação do sistema. Este efeito é conhecido como *backflow*. Desta forma conforme aumentamos a concentração de partículas em uma suspensão, a velocidade média de sedimentação do sistema diminui. Estes efeitos são representados graficamente no desenho esquemático em (6.11).

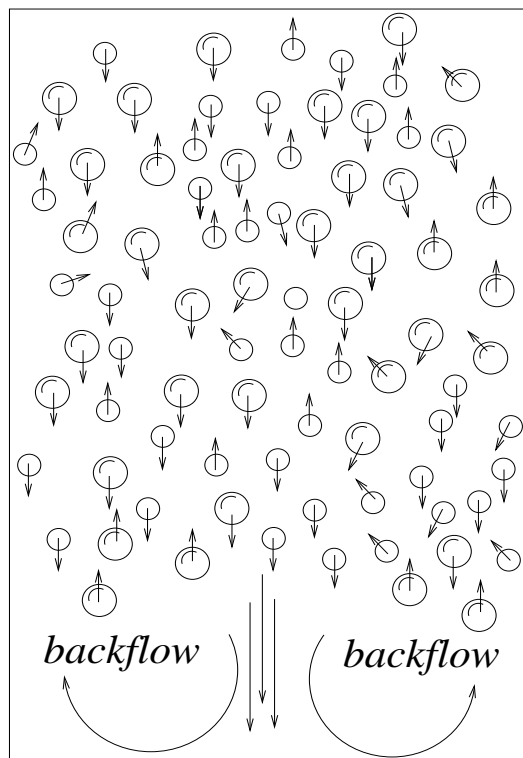


Figura 6.11: Ilustração esquemática do efeito backflow e do surgimento de correntes convectivas no interior de uma suspensão devido às interações entre as partículas

O gráfico em (6.12) mostra a comparação entre os valores numéricos com a teoria assintótica de Batchelor (1972), equação (6.90), e as correlações empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988), equações (6.91) e (6.92). É possível notar boa concordância entre os valores numéricos e a base de dados disponível na literatura, indicativo de que a implementação de interações hidrodinâmicas periódicas com a metodologia descrita, além de gerar valores convergentes da velocidade média, gera uma física consistente do ponto de vista do comportamento desta propriedade com a distribuição de partículas na suspensão.

$$\frac{U(\phi)}{U_s} = 1 - 5\phi + O(\phi^2) \quad (6.90)$$

$$\frac{U(\phi)}{U_s} = (1 - \phi)^n, \quad \text{com} \quad n = 5.1 \quad (6.91)$$

$$\frac{U(\phi)}{U_s} = 1 + \phi - \frac{1}{5}\phi^2 - \frac{6}{5}\phi \left(\frac{5 - \phi + 0.5\phi^2}{1 + 2\phi} \right). \quad (6.92)$$

É possível notar uma excelente concordância entre os valores numéricos e as correlações de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988) pra frações volumétricas de partícula de até 20%. Este é um indicativo de que a implementação no código computacional destas interações está correta e gera uma física consistente para a computação de interações hidrodinâmicas.

Outro teste interessante de validação consiste na comparação da velocidade média em função de $\phi^{1/3}$ para um arranjo ordenado de partículas, com distribuição ilustrada na figura (6.13). As teorias assintóticas de Hasimoto (1959), equação (6.93), e Sangani e Acrivos (1982), equação (6.94), são comparadas com os valores numéricos.

$$\frac{U(\phi)}{U_s} = 1 - 1.7601\phi^{1/3} + \phi - 1.5593\phi^2 + O(\phi^{8/3}) \quad (6.93)$$

$$\frac{U(\phi)}{U_s} = 1 - 1.7601\phi^{1/3} + \phi - 1.5593\phi^2 + 3.9973\phi^{8/3} - 3.074\phi^{10/3} + O(\phi^{11/3}) \quad (6.94)$$

É possível notar excelente concordância entre os valores numéricos e as equações (6.93) e (6.94). Para valores de $\phi^{1/3}$ da ordem de 0.45, o que corresponde a uma fração

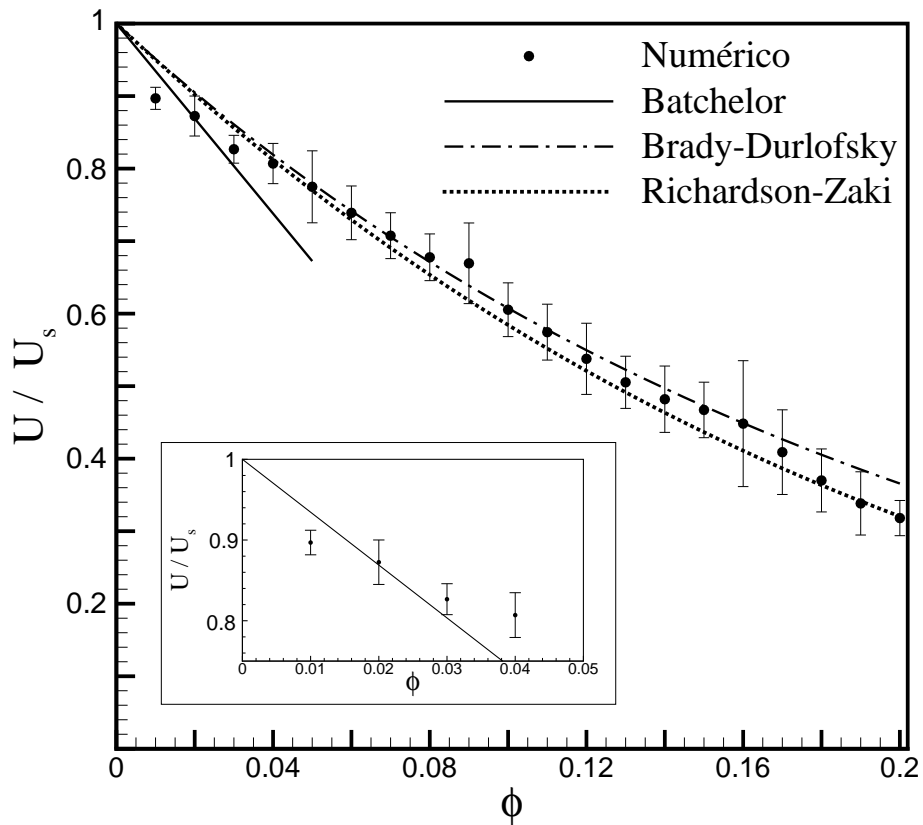


Figura 6.12: Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas

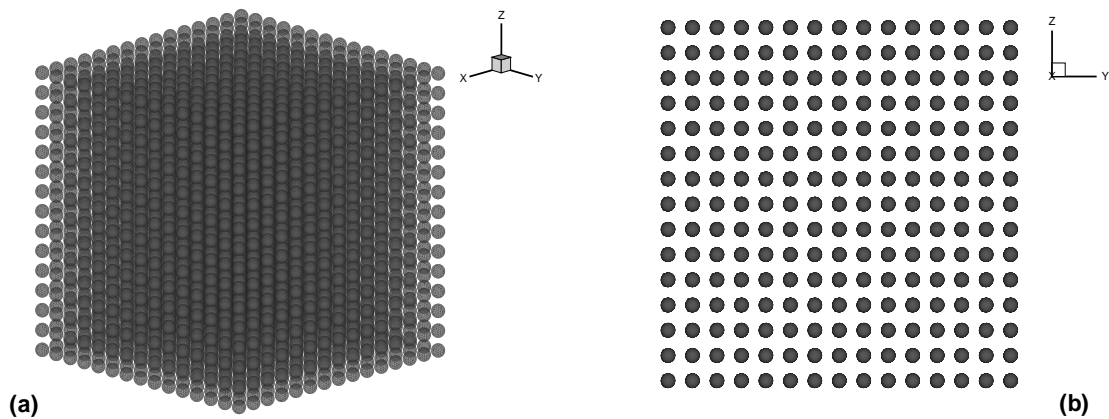


Figura 6.13: Distribuição espacial de partículas para um arranjo ordenado com 125 lattices e 27 partículas em cada lattice

volumétrica da ordem de 0.09, as correlações de Hasimoto (1959) e Sangani e Acrivos (1982) começam a divergir devido ao efeito de interação entre as partículas, enquanto

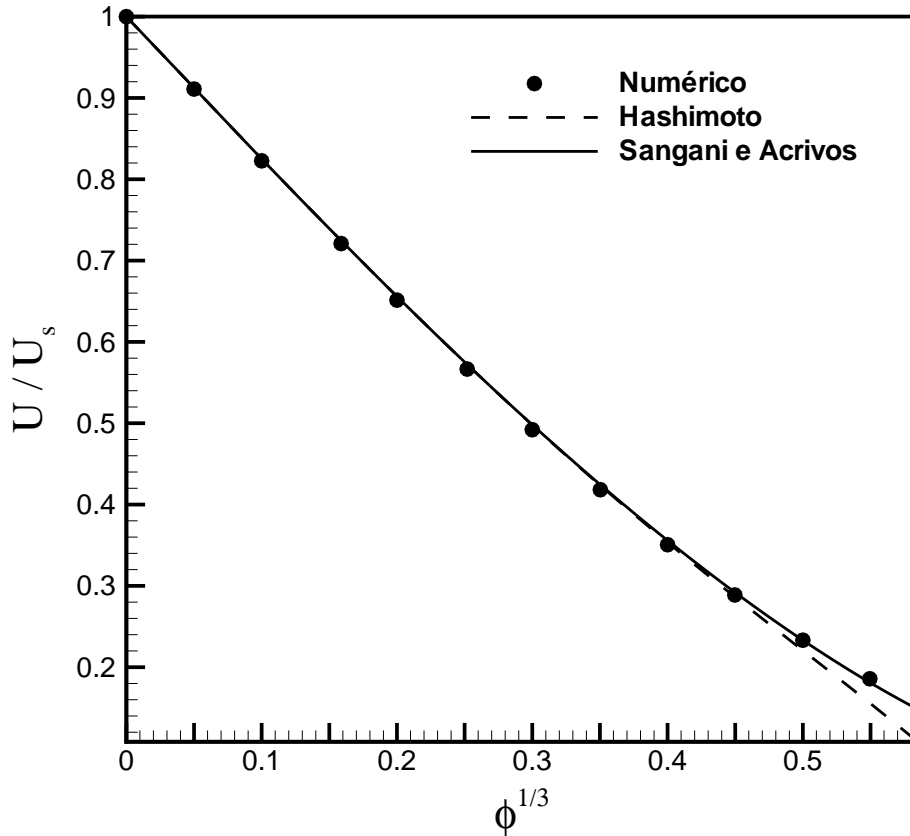


Figura 6.14: Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas para um arranjo ordenado com 125 lattices e 27 partículas em cada lattice

a resposta numérica continua acompanhando o comportamento da teoria de Sangani e Acrivos (1982).

Os resultados numéricos mostrados até o momento indicam um comportamento consistente do sistema de interações hidrodinâmicas e de sua implementação utilizando a metodologia proposta com uma geometria periódica e com as mobilidades periódicas de Bennakker (1986) que consideram o uso das somas de Bravais aplicadas ao tensor mobilidade de Rotne-Prager (1969). As seções seguintes mostram resultados obtidos para problemas envolvendo interações hidrodinâmicas e magnéticas simultaneamente através da metodologia descrita nesta seção.

6.5 Influência das interações magnéticas no comportamento dinâmico do sistema particulado

Esta seção ilustra os resultados obtidos quando o problema de interações magnéticas entre as partículas é considerado. Tanto as interações entre os momentos de dipolo das partículas para força e torque são consideradas, quanto as interações entre um campo externo e os momentos de dipolo de cada partícula, também para força e torque. Os principais resultados apresentados e discutidos nesta seção são: convergência da variância do sistema devido ao efeito de interação magnética, influência das interações magnéticas na velocidade média de sedimentação do sistema, contribuição de ψ_m e ϕ nas flutuações de velocidade do sistema, anisotropia destas flutuações e dos tempos de correlação em diferentes direções na presença de interações magnéticas, comportamento long-time da função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade do sistema e a influência do número de Péclet na magnetização da suspensão, bem como de α e ϕ .

6.5.1 Influência das interações magnéticas na velocidade média de sedimentação

O estudo da velocidade média de sedimentação de sistemas particulados na presença de interações hidrodinâmicas é um assunto muito explorado por físicos e engenheiros. Atualmente nós temos uma boa ideia de como alguns mecanismos como o efeito backflow e a interação hidrodinâmica não linear entre as partículas que compõe uma suspensão podem retardar a velocidade média de sedimentação do sistema, conforme mostrado e testado no presente trabalho nos gráficos (6.12) e (6.14). Entretanto não existe nenhuma base de dados que ilustra como a intensidade das interações magnéticas entre partículas micrométricas que compõe uma suspensão magneto-reológica influencia os valores médios da velocidade de sedimentação do sistema.

A figura (6.15) ilustra o comportamento com relação ao tempo da velocidade média de sedimentação de uma suspensão contendo 172 partículas para 5 realizações em simulações de longo tempo. O tempo de simulação vai até 200 tempos de Stokes (a/U_s). A comparação é feita para um caso em que não existem interações magnéticas, $\psi_m = 0$, com um caso com interações magnéticas com intensidade $\psi_m = 50$ para $Pe \rightarrow \infty$.

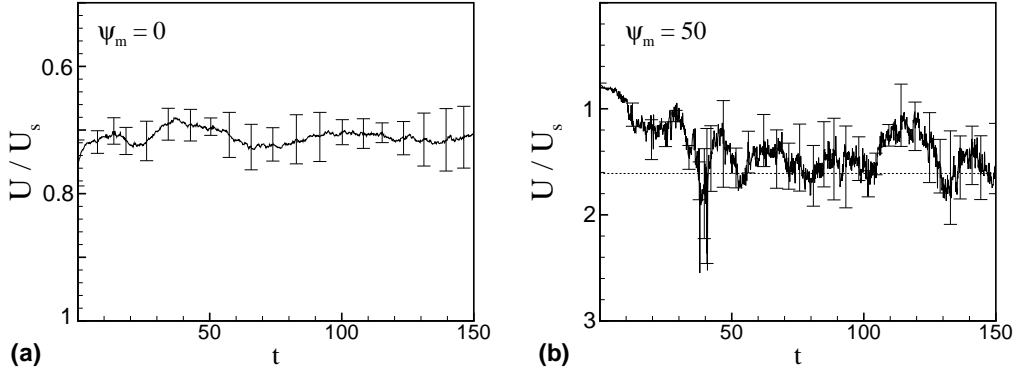


Figura 6.15: Velocidade média de sedimentação do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas com $\psi_m = 0$ (a) e $\psi_m = 50$ (b)

É possível notar que após um tempo suficientemente longo, da ordem de 50 tempos de Stokes, a velocidade média do sistema na presença de interações magnéticas com o parâmetro $\psi_m = 50$ mais do que dobra, indo de um valor inicial da ordem de 0.7 para valores próximos de 1.5, enquanto o problema apenas com interações hidrodinâmicas mantém uma velocidade média constante ao longo do tempo, sendo esta variável o que nós chamamos de variável estatisticamente estacionária. Do ponto de vista físico este comportamento é um indicativo que as interações magnéticas possuem um caráter mais agregativo e conforme a simulação evolui no tempo microagregados começam a se formar e conseqüentemente sedimentam a uma velocidade maior do que a velocidade de uma única esfera isolada. Em um artigo recente Benes, Tong e Ackerson (2007) comentam que suspensões de esferas rígidas sujeitas a forças agregativas sedimentam com velocidades maiores que aquelas previstas por modelos baseados apenas no efeito de *backflow*.

Por um simples balanço entre forças viscosas e forças de empuxo no regime de baixo número de Reynolds é possível mostrar que a velocidade média de sedimentação de um agregado, U_a , formado em torno de uma esfera imaginária de raio R_a é dada por

$$U_a = U_s \phi_a \left(\frac{R_a}{a} \right)^2, \quad (6.95)$$

em que ϕ_a é a fração volumétrica de partículas no agregado, dada por

$$\phi_a = \frac{N4\pi a^3}{3} \frac{3}{4\pi R_a^3} = N \left(\frac{a}{R_a} \right)^3, \quad (6.96)$$

em que N é o número de partículas dentro do agregado. Desta forma um agregado sedimenta muito mais rápido do que uma única partícula isolada. De fato, as interações

magnéticas quebram a distribuição inicial randômica de uma suspensão estatisticamente homogênea. Conforme a suspensão evolui, alguns vazios se formam no interior do reticulado devido à formação de microagregados. Esta dinâmica pode ser vista nas figuras (6.16) e (6.17).

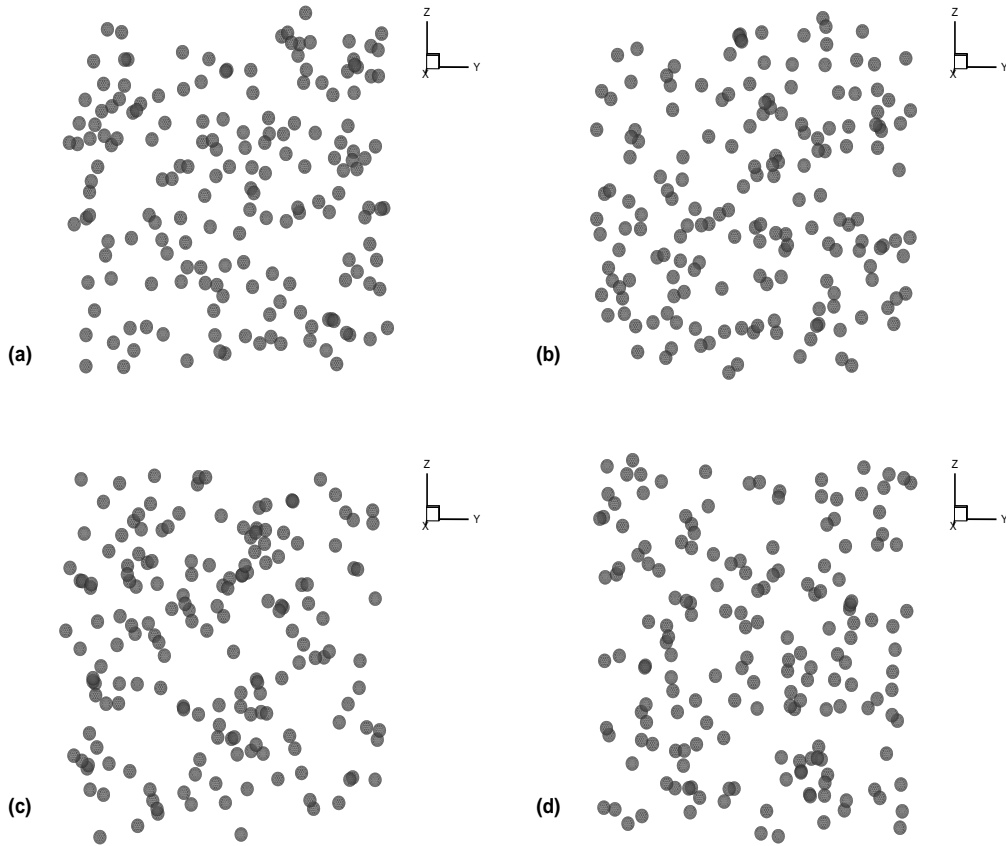


Figura 6.16: Evolução típica da microestrutura de uma suspensão de partículas rígidas monodispersa com $\phi = 0.03$, no limite de $Pe \rightarrow \infty$, na ausência de interações magnéticas. Instante inicial (a), $t = 50a/U_s$ (b), $t = 100a/U_s$ (c) e $t = 200a/U_s$ (d)

Pela figura (6.16) é possível observar que por mais que a configuração das partículas esteja mudando continuamente devido à presença de interações hidrodinâmicas, esta sempre permanece randômica ao longo do processo evolutivo. Já a figura (6.17) mostra que na presença de interações magnéticas esta randomicidade da estrutura do sistema particulado é prontamente quebrada e conforme a simulação evolui no tempo cada vez mais microagregados são formados, fazendo com que uma grande região de vazios surja no interior do reticulado.

Esta dinâmica de formação de agregados influencia fortemente os valores da veloci-

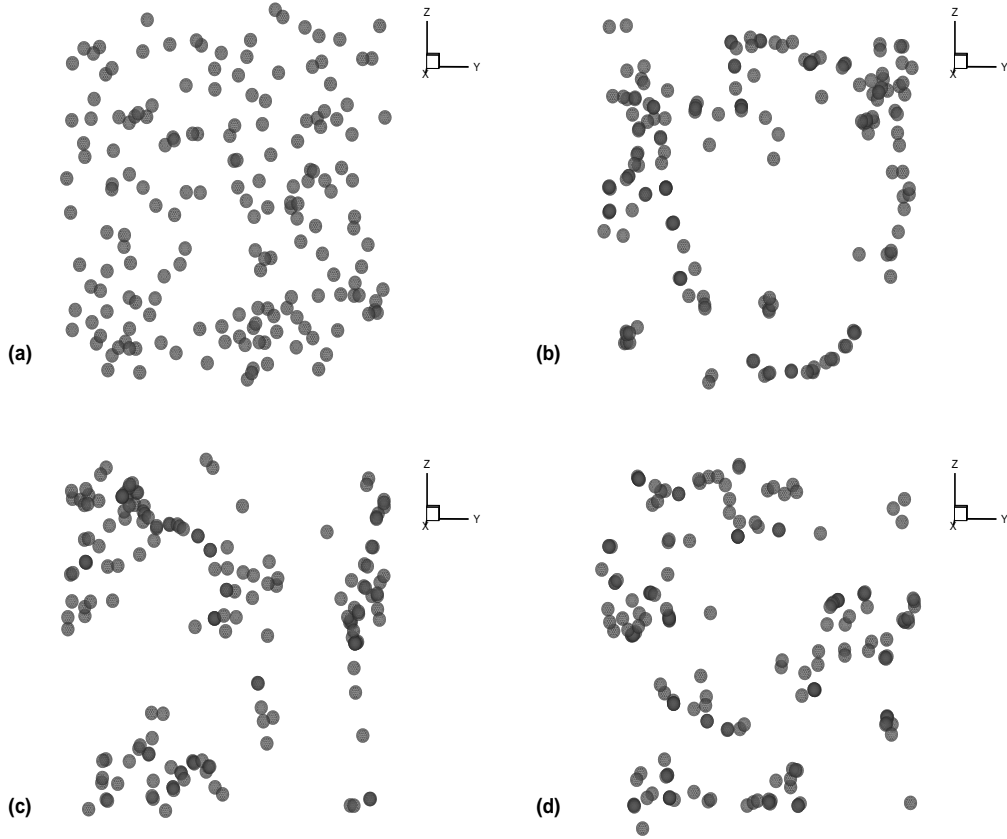


Figura 6.17: Evolução típica da microestrutura de uma suspensão de partículas rígidas monodispersa com $\phi = 0.03$, no limite de $Pe \rightarrow \infty$, na presença de interações magnéticas sem campo externo e com $\psi_m = 50$. Instante inicial (a), $t = 50a/U_s$ (b), $t = 100a/U_s$ (c) e $t = 200a/U_s$ (d)

dade média de sedimentação do sistema. É importante mencionar que nas simulações realizadas até o momento, incluindo as que formaram a figura (6.17) não existe nenhum campo externo aplicado na suspensão, de modo que esta dinâmica agregativa surge de forma espontânea devido simplesmente às interações magnéticas para força e torque entre os momentos de dipolo das partículas. Além disso, devido a periodicidade do sistema, em muitos momentos alguns agregados que estão sedimentando são quebrados de forma artificial, pois as partículas que se encontram na região inferior do agregado retornam à parte superior da lattice antes das partículas que se localizam no interior do agregado e principalmente na parte superior deste. Mesmo assim, apesar de uma quebra contínua em determinados microagregados, devido à condição de contorno periódica e forças repulsivas de curto alcance, a tendência média do sistema é a de que estes agregados continuem se formando a uma taxa semelhante a taxa de quebra, de modo que em termos médios a velocidade média de sedimentação do sistema sature e se

estabilize em um valor constante, o que indica um patamar crítico, no qual para dada fração volumétrica ϕ e intensidade de interações magnéticas ψ_m existe um tamanho médio e um número médio de agregados que se mantêm constantes ao longo do tempo.

Com o intuito de explorar melhor os efeitos das interações magnéticas, em conjunto com as interações hidrodinâmicas, a figura (6.18) mostra o comportamento da velocidade média de sedimentação do sistema em função da fração volumétrica de partículas para o caso em que não estão presentes interações magnéticas ($\psi_m = 0$) comparadas com a mesma dinâmica para simulações com interações magnéticas regidas por um parâmetro $\psi_m = 50$. Os resultados são comparados com as curvas empíricas de Richardson-Zaki (1954) e Brady-Durlofsky (1988), bem como com a teoria assintótica de Batchelor (1972).

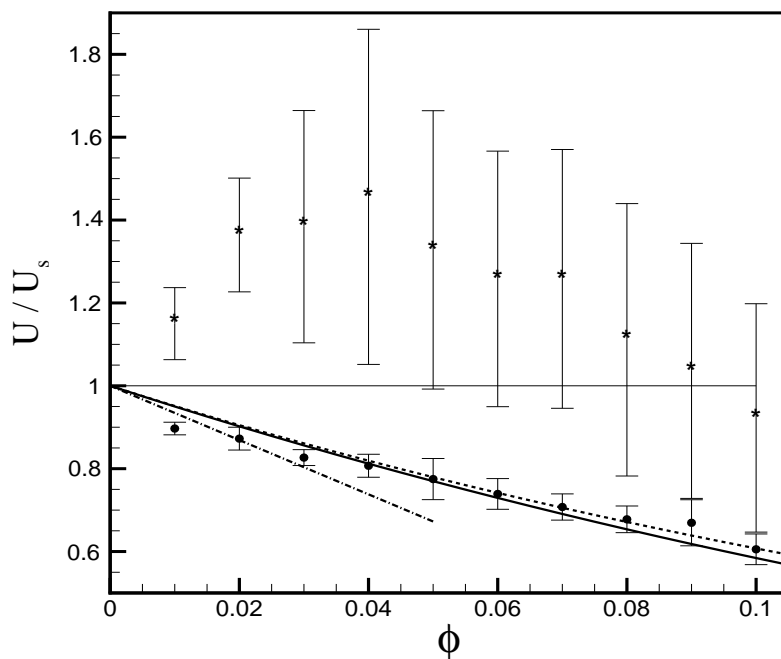


Figura 6.18: Variação da velocidade média de sedimentação em função da fração volumétrica de partículas na presença de interações magnéticas. A linha contínua mais grossa denota a correlação empírica de Richardson-Zaki (1954), a linha tracejada corresponde à correlação de Brady-Durlofsky (1988), a linha traço-ponto representa a teoria assintótica de Batchelor (1972), os valores numéricos são dados para o caso sem interações magnéticas (círculos preenchidos) e para interações magnéticas com $\psi_m = 50$ (asterisco)

A figura (6.18) ilustra um fenômeno físico extremamente interessante. Enquanto

que para o caso de uma suspensão não magnética, conforme aumentamos a fração volumétrica de partículas a velocidade média de sedimentação do sistema diminui devido ao efeito *backflow* e à própria não linearidade das interações hidrodinâmicas que eventualmente fazem com que certas partículas da suspensão apresentem movimento ascendente devido às interações com outras partículas, uma suspensão na presença de interações magnéticas possui dois padrões de comportamento distintos dependendo da fração volumétrica de partículas.

Inicialmente conforme a fração volumétrica de partículas aumenta, uma partícula possui mais facilidade em interagir com outra devido à proximidade destas no interior da suspensão, como a natureza destas interações é predominantemente agregativa ao invés de repulsiva o aumento da fração volumétrica facilita o processo de formação de agregados e como se sabe as partículas no interior de um agregado sedimentam mais rápido quando comparadas com uma partícula isolada. Entretanto, como existem interações hidrodinâmicas ocorrendo simultaneamente, o efeito *backflow*, bem como a retardação na velocidade de certas partículas no interior da suspensão devido às próprias interações hidrodinâmicas também estão ocorrendo e competindo com esta tendência de aumento na velocidade média do sistema devido à formação de microagregados induzidos por interações magnéticas.

O que se observa pelo gráfico da figura (6.18) é que para valores de ϕ até 0.04, a taxa de formação de agregados com o aumento da fração volumétrica das partículas é mais intensa em relação ao retardamento na velocidade média de sedimentação do sistema devido ao efeito *backflow* e à presença de interações hidrodinâmicas. Esta intensidade ao qual se refere consiste simplesmente no efeito em que a formação de agregados tem sobre o aumento da velocidade média de sedimentação da suspensão. Para valores de $\phi > 0.04$ o gráfico de (6.18) indica que o efeito *backflow* em conjunto com as interações hidrodinâmicas passa a dominar a taxa de formação de agregados, como se para valores mais altos de ϕ os tamanhos médios de agregados e o número de partículas em cada agregado estivessem atingido um limite crítico e deste momento em diante a suspensão passa a ser vista como um conjunto de agregados de tamanho fixo, que fornece uma dinâmica muito próxima a da de uma suspensão de esferas rígidas, porém com diâmetros maiores.

É interessante notar o quanto a presença de interações magnéticas é capaz de influenciar a velocidade média de sedimentação da suspensão. Para valores de ϕ da ordem de 4% o sistema na presença de interações magnéticas sedimenta com uma velocidade

média igual a $1.46U_s$, enquanto que na ausência destas interações sua velocidade média de sedimentação é igual a $0.79U_s$, esta diferença representa um aumento de 84.81% na velocidade média de sedimentação do sistema, em termos práticos em sistemas de separação líquido-sólido o controle da velocidade de sedimentação e conseqüentemente da velocidade de separação pode ser feito em sistemas particulados magnéticos através de um controle da fração volumétrica de partículas e do parâmetro ψ_m , que leva em conta basicamente o tamanho das partículas, o material do qual elas são compostas e a temperatura do fluido.

6.5.2 Influência das interações magnéticas na variância do sistema

A figura (6.10) mostrou como as interações hidrodinâmicas geram um comportamento divergente da variância do sistema particulado. Em outras palavras, a simulação computacional de sistemas particulados considerando apenas interações hidrodinâmicas não é capaz de gerar um resultado convergente da variância do sistema, pois conforme aumenta-se o número de partículas das simulações o valor da variância do sistema aumenta e mesmo para um número muito grande de partículas não atinge um patamar estável. Este é um problema clássico em simulações de muitos corpos com interações hidrodinâmicas.

A fim de compreender como a presença de interações magnéticas influencia o comportamento numérico da variância do sistema particulado uma exaustiva análise de convergência foi realizada. Para diferentes intensidades do parâmetro magnético ψ_m foram realizados testes de convergência do sistema para um valor fixo de ϕ igual a 5%, na condição em que $Pe \rightarrow \infty$. Estes testes consistem basicamente em observar o comportamento da variância em determinada direção em função do número de partículas do sistema, que neste caso é expresso em termos do tamanho da lattice central L/a , em que L denota o comprimento da aresta de uma lattice central cúbica e a é o raio de uma partícula. Em todas as simulações foram consideradas 10 realizações simultâneas e apenas simulações estáticas foram realizadas. Os resultados desta análise são apresentados nos gráficos das figuras (6.19) e (6.20).

É possível observar que a mistura de interações magnéticas com decaimento mais rápido, da ordem de $1/r^4$ para força e $1/r^3$ para torque, com interações hidrodinâmicas de decaimento lento, da ordem de $1/r$, gera uma resposta mais estável da variância, que dependendo da intensidade do parâmetro de interação magnética ψ_m leva a um compor-

tamento mais próximo do que se esperava para uma propriedade estatística convergente com o tamanho do sistema. Mesmo em simulações estáticas, nas quais a suspensão não tem tempo de evoluir para que sua microestrutura seja significativamente altera esse comportamento é observado e conforme o valor de ψ_m aumenta a variância da velocidade do sistema tende a um platô de saturação com o aumento do tamanho do sistema. Em resumo: a convergência da variância está diretamente associado ao fato de que para valores de ψ_m suficientemente grandes as interações magnéticas convergentes dominam as interações hidrodinâmicas divergentes e geram valores convergentes da variância do sistema. Este resultado é inédito e mostra um caso em que através de simulações computacionais considerando interações hidrodinâmicas periódicas é possível obter valores convergentes da variância do sistema devido às interações magnéticas.

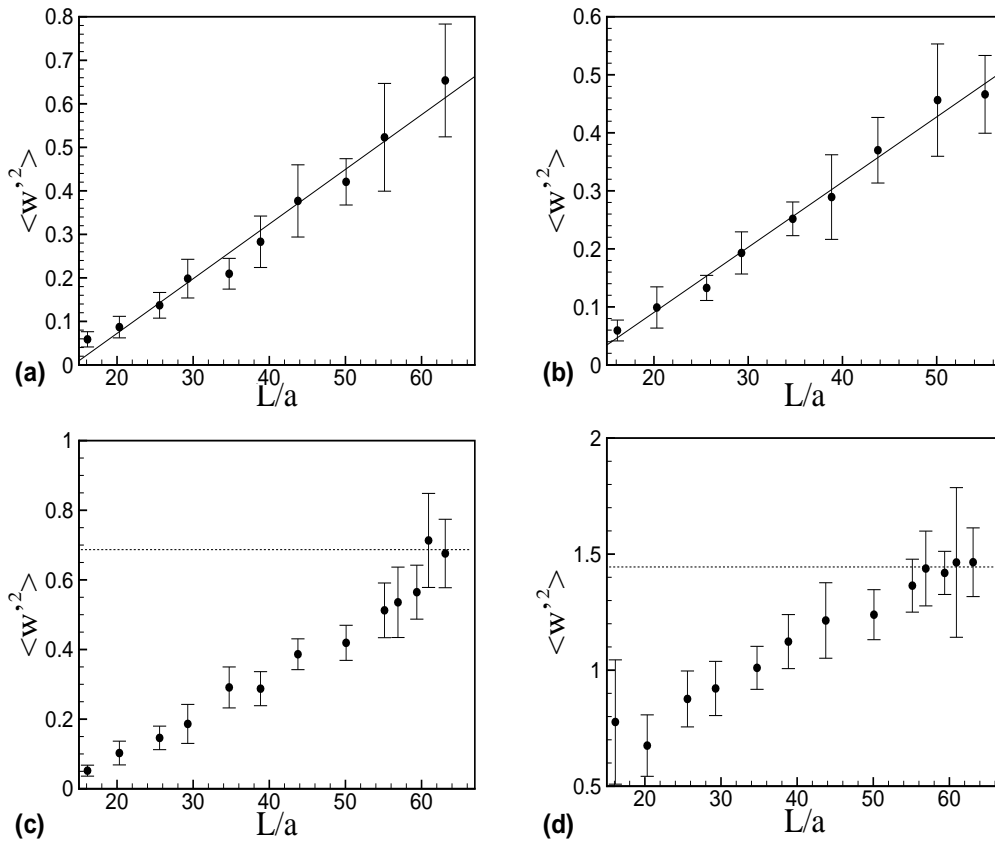


Figura 6.19: Análise de convergência da variância do sistema para $\psi_m = 0$ (a), $\psi_m = 1$ (b), $\psi_m = 10$ (c) e $\psi_m = 100$ (d)

Finalmente, com um comportamento convergente desta importante variável estatística que está diretamente associada às propriedades da suspensão como pressão de partícula e viscosidade de partícula é agora possível determinar numericamente como a variância de um sistema particulado varia em função dos principais parâmetros da

suspensão e garantir que o valor numérico obtido através de simulações computacionais seja um valor convergente e confiável.

Esta análise é consistente com o estudo de convergência feito no capítulo anterior no qual para um código de simulações de muitos corpos sem a presença de interações hidrodinâmicas apresentou comportamento convergente para a variância do sistema na presença apenas de interações magnéticas. O mais interessante desta análise é que a convergência pode ser controlada por um parâmetro físico associado à intensidade destas interações magnéticas. Este resultado mostra inclusive uma física mais interessante, que pode ser aplicada à problemas diferentes envolvendo interações de muitos corpos.

Por mais que exista um sério problema de convergência associado à interações entre corpos quando estas apresentam decaimentos lentos, devido à não-linearidade da dinâmica de simulações de muitos corpos, a mistura de outros tipos de forças e torques associados à interação entre partículas com decaimentos rápidos pode levar, dependendo da intensidade dos parâmetros físicos associados à cada tipo de força a um comportamento convergente de propriedades médias da suspensão como um todo.

Este resultado de certa forma abre as portas para a quebra do paradigma de que interações entre partículas com decaimentos lentos sempre levarão a um comportamento divergente da variância do sistema quando esta for computada em simulações computacionais de muitos corpos.

De um modo geral valores de ψ_m acima de 100 garantem um comportamento satisfatório do ponto de vista de convergência da variância. Mesmo que os últimos pontos estejam indicando o início de um comportamento de saturação desta propriedade para valores de $\psi_m = 10$, para valores de ψ_m maiores do que este patamar o comportamento convergente da variância se torna cada vez mais claro. Comparando por exemplo a diferença percentual no valor da variância na direção da gravidade considerando um sistema com 2000 partículas na lattice central e outro com 3000 partículas, observa-se que para o problema sem interações magnéticas, ou seja, para $\psi_m = 0$ essa diferença é de cerca de 25% enquanto que para $\psi_m = 160$ este valor cai para 1.16%.

É importante frisar que para esta fração volumétrica $\phi = 0.05$ comprimentos da lattice adimensionais L/a da ordem de 60 já demandam um número de partículas na lattice central da ordem de 3000 partículas, como 125 lattices são consideradas, mesmo

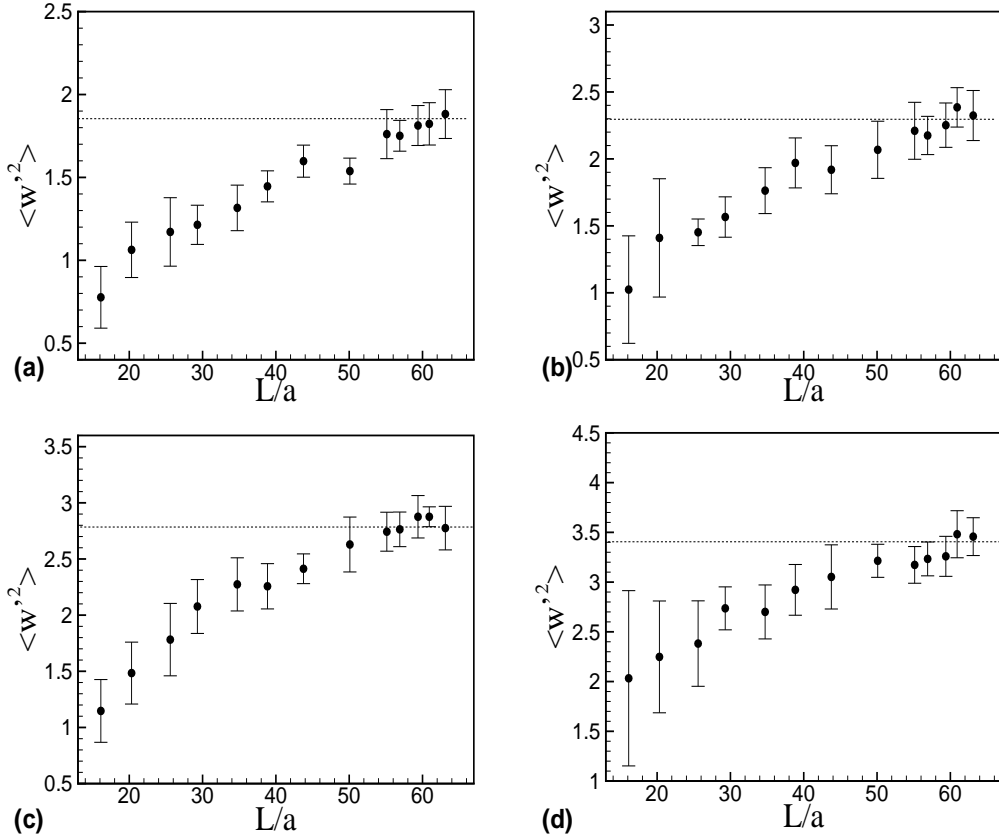


Figura 6.20: Análise de convergência da variância do sistema para $\psi_m = 120$ (a), $\psi_m = 140$ (b), $\psi_m = 160$ (c) e $\psi_m = 180$ (d)

simulações estáticas com esta ordem de magnitude em termos do número de partículas já passam a ser extremamente caras, pois é necessário a computação de interações entre cada uma das 3000 partículas da lattice central com outras $125 \times 3000 = 375000$ partículas distribuídas pelas lattices contendo as partículas imagens.

A figura (6.21) ilustra o comportamento para a variância do sistema na direção da gravidade, considerando simulações estáticas contendo 3000 partículas na lattice central em função de ψ_m para uma fração volumétrica de partículas fixa e igual à 5%.

O comportamento indicado na figura (6.21) mostra que a variância do sistema na direção da gravidade segue uma lei em função de ψ_m do tipo

$$\langle w'^2 \rangle = c_0 + c_1 \psi_m + c_2 \psi_m^2 + O(\psi_m^3) \quad (6.97)$$

em que os coeficientes c_0 , c_1 e c_3 são na verdade funções de ϕ . Este comportamento é semelhante ao observado para a mesma análise realizada no capítulo anterior na ausência

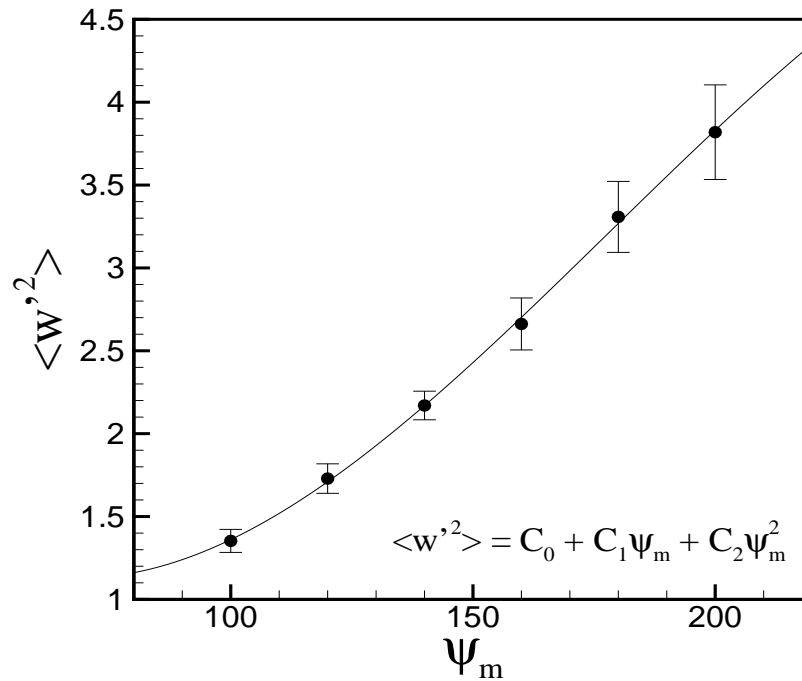


Figura 6.21: Variância do sistema na direção paralela à gravidade em função de ψ_m para $\phi = 0.05$ com 2000 partículas na lattice central em um reticulado com 125 lattices

de interações hidrodinâmicas, entretanto a ordem de magnitude das flutuações induzidas por interações magnéticas e hidrodinâmicas simultaneamente é consideravelmente maior (da ordem de 100 vezes). A fim de determinar o comportamento desta mesma variável em função da fração volumétrica de partículas foi avaliado para um valor fixo de $\psi_m = 100$ como a variância do sistema varia em função da fração volumétrica de partículas. Este gráfico é apresentado na figura (6.22).

É importante notar que só foram analisadas situações para valores convergentes da variância do sistema com base na análise de convergência realizada nesta mesma seção nas figuras (6.19) e (6.20). A figura (6.22) indica um comportamento da variância em função de ϕ do tipo

$$\langle w'^2 \rangle = f_0 \phi^n. \quad (6.98)$$

Este comportamento é fisicamente consistente, pois não leva a predição de valores da variância que crescem sem controle com o aumento da fração volumétrica de partículas, inconsistência esta apresentada na seção anterior na ausência de interações hidrodinâmicas.

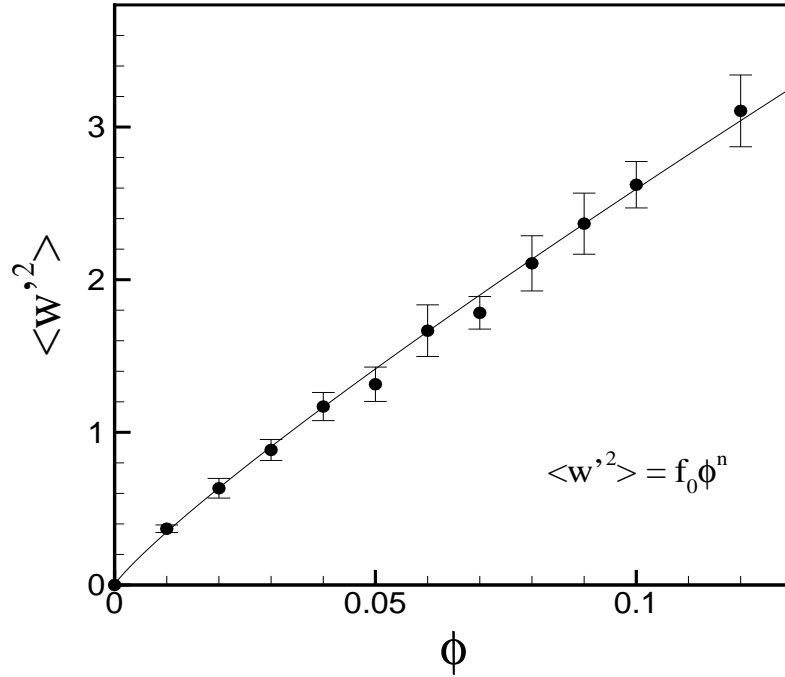


Figura 6.22: Variância do sistema na direção paralela à gravidade em função de ϕ para $\psi_m = 100$ com 2000 partículas na lattice central em um reticulado com 125 lattices

6.5.3 Análise long-time das flutuações de velocidade

Uma análise do comportamento de longo tempo das flutuações de velocidade do sistema é apresentada nesta seção. O principal objetivo desta análise consiste em entender como memória pode ser adicionada ou retirada do sistema particulado através da inclusão de efeitos associados à interações magnéticas entre as esferas. As duas principais variáveis estatísticas analisadas neste contexto são: a função autocorrelação das flutuações de velocidade normalizada $R(t)$ e o tempo de correlação do sistema τ_c , ambos definidos por

$$R(t) = \frac{\langle u'(\tau) \rangle \langle u'(t + \tau) \rangle}{\langle u'(\tau)^2 \rangle} \quad (6.99)$$

e

$$\tau_c = \int_0^\infty R(t) dt, \quad (6.100)$$

tanto a função autocorrelação normalizada $R(t)$ das flutuações de velocidade quanto o tempo de correlação do sistema τ podem ser determinados para a análise das flutuações de velocidade do sistema em cada uma das três direções do espaço. O operador $\langle \rangle$ denota médias em cima de várias realizações. A principal informação a ser extraída das variáveis $R(t)$ e τ_c consiste em entender como a flutuação de velocidade de uma partícula

em um instante qualquer é influenciada pelo estado do sistema como um todo em um instante de tempo anterior, separados por um intervalo de tempo t , além de determinar também quanto tempo demora para que as flutuações de velocidade de um sistema não estejam mais acopladas com a estrutura deste em um instante de tempo anterior. Sabe-se que para processos sem memória, conhecidos como processos Markovianos, como por exemplo movimento browniano, este tempo de correlação tende a zero e o estado do sistema em tempos futuros praticamente independente das configurações anteriores. Este mesmo comportamento não ocorre em suspensões sujeitas à interações hidrodinâmicas e magnéticas, por exemplo.

As figuras (6.23) e (6.24) ilustram o comportamento do tempo de correlação das flutuações de velocidade para direções perpendiculares e paralelas à gravidade para o caso sem interações magnéticas ($\psi_m = 0$) e com interações magnéticas ($\psi_m = 30$) para uma fração volumétrica de partículas $\phi = 0.03$ na ausência de movimento Browniano ($Pe \rightarrow \infty$).

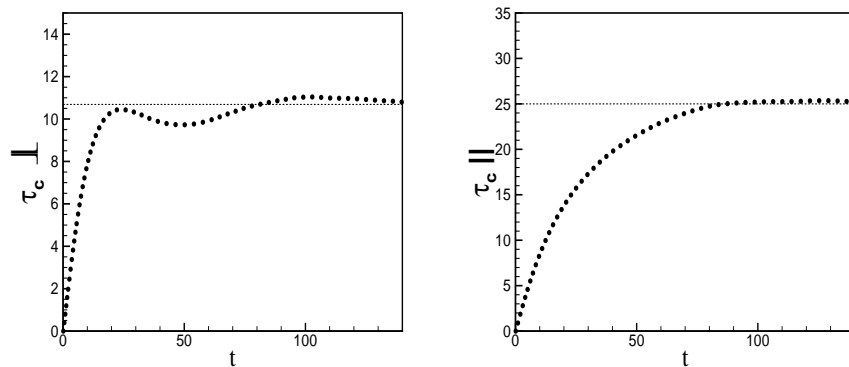


Figura 6.23: Tempo de correlação das flutuações de velocidade sem interações magnéticas

As simulações foram realizadas com 172 partículas na lattice central, considerando 125 lattices distribuídas no espaço físico e outras 125 no espaço recíproco e as médias foram tomadas para cada ponto em cima de 5 realizações. O número de partículas e realizações considerados nesse caso é relativamente baixo devido ao alto custo computacional de uma simulação de longo tempo. Neste caso foram considerados 200 tempos de Stokes, o que equivale à 20000 passos de tempo.

É possível perceber pelos gráficos das figuras (6.23) e (6.24) que para esta intensidade do parâmetro $\psi_m = 30$ o tempo de correlação do sistema é menor em ambas as direções quando comparado com o caso sem interações magnéticas. Este comporta-

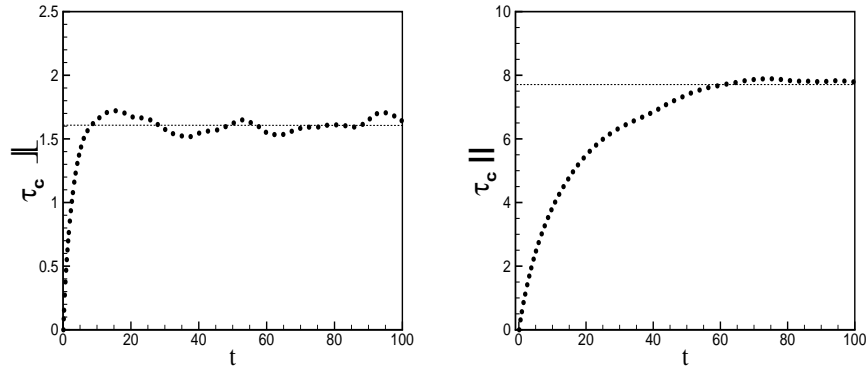


Figura 6.24: Tempo de correlação das flutuações de velocidade com interações magnéticas

mento indica uma tendência de que estas flutuações induzidas por interações magnéticas devido ao rápido decaimento quebram ligeiramente a adição de efeitos de memória do sistema introduzidos por decaimentos lentos associados à interações hidrodinâmicas.

Na realidade a física por trás do comportamento dessas flutuações é consideravelmente mais intrincada, complexa e rica do que isso. A fim de explorar melhor em detalhes como o efeito de interação magnética age no sentido de “adicionar ou retirar memória” do sistema, o comportamento da função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade foi plotado para diferentes valores de ψ_m e em ambas as direções (paralela e perpendicular à gravidade). Estes gráficos são representados nas figuras (6.25) e (6.25).

É possível notar que para a direção perpendicular à gravidade conforme aumenta-se a intensidade das interações magnéticas as flutuações das componentes de velocidade perpendiculares à direção da gravidade ficam cada vez mais descorrelacionadas com a condição do sistema particulado em instantes de tempo anteriores, como se na realidade essas interações gerassem flutuações de velocidade mais parecidas com flutuações induzidas por movimento browniano do que com interações hidrodinâmicas de decaimento lento.

Já para a direção paralela à gravidade, figura (6.26), o cenário é diferente. Para valores de ψ_m até um determinado limite as flutuações de velocidade na direção de sedimentação induzidas por interações magnéticas são mais correlacionadas do que no caso puramente hidrodinâmico. A partir de um valor crítico de ψ_m o comportamento passa a ser o inverso, semelhante ao comportamento qualitativo apresentado para a

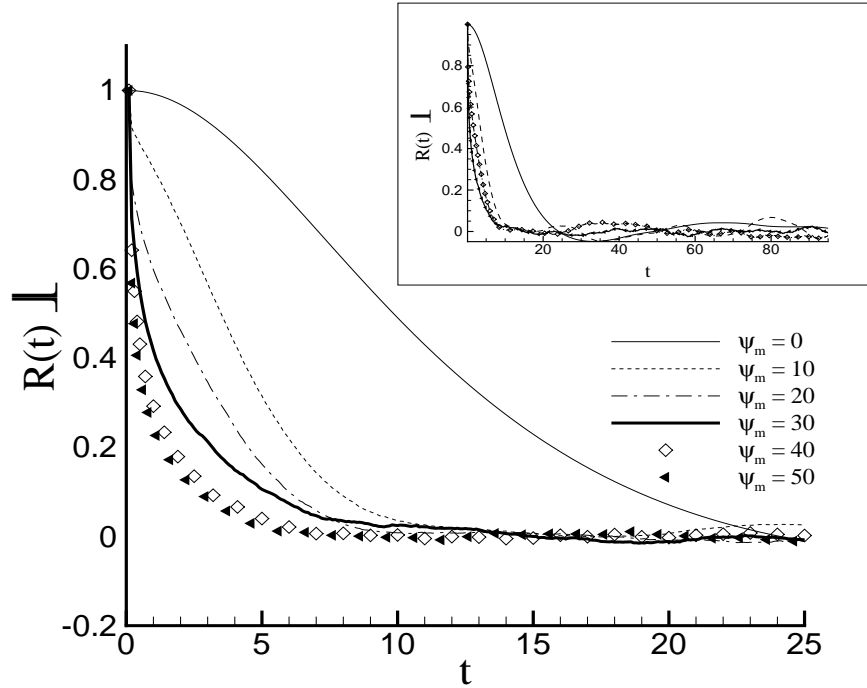


Figura 6.25: Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade na direção perpendicular à gravidade na presença de interações magnéticas

análise destas flutuações na direção perpendicular à da gravidade.

Uma possível explicação para este comportamento *anômalo* pode estar relacionada à alteração em características microestruturais da suspensão que dependem fortemente da intensidade das interações magnéticas. Uma hipótese seria que a taxa de formação de agregados e o número médio de partículas por agregado atingem um valor crítico de saturação para determinado valor de ψ_m . Para valores maiores da intensidade do parâmetro de interação magnética o aspecto microestrutural permanece semelhante em termos de números de agregados e números de partículas por agregado, porém a intensidade das flutuações de velocidade de partículas isoladas, não pertencentes à nenhum agregado são mais intensas e podem dominar as flutuações médias dos agregados, fazendo com que o comportamento médio da suspensão tenda a se aproximar de uma física mais próxima do que ocorre em movimento browniano quando comparado com as flutuações de velocidade induzidas por interações hidrodinâmicas puras.

A figura (6.27) ilustra diferentes configurações da suspensão, todas obtidas após 200 tempos de Stokes de evolução temporal, para condições iniciais randômicas igualmente prováveis, alterando apenas a intensidade do parâmetro de interação magnética ψ_m .

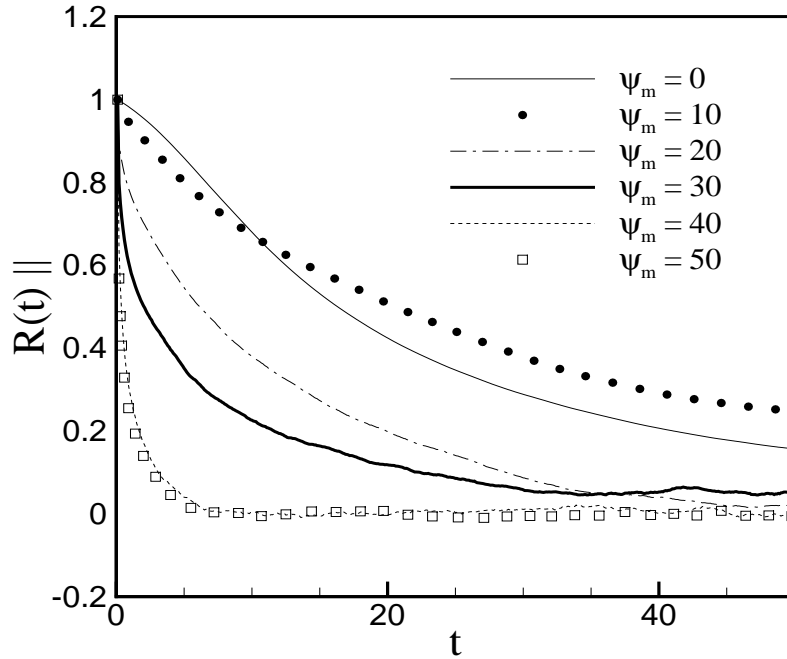


Figura 6.26: Função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade na direção paralela à gravidade na presença de interações magnéticas

É possível notar que o aspecto microestrutural da suspensão vai sendo alterado gradativamente com o aumento de ψ_m até valores de $\psi_m = 20$. Para intensidades maiores do parâmetro magnético associado à interação entre as partículas o aspecto microestrutural da suspensão não sofre grandes alterações em termos de regiões de vazio, número de agregados e número médio de partículas por agregado. É justamente o valor crítico de $\psi_m = 20$ que gera a mudança de comportamento da função $R(t)$ na direção paralela à gravidade, observado no gráfico (6.26). Ou seja, pode-se pensar que o aspecto microestrutural da suspensão não muda de forma significativa para valores de ψ_m maiores que 20, mas a intensidade das flutuações de velocidade de partículas isoladas não pertencentes a nenhuma estrutura agregativa aumentam de forma significativa, de modo que essas flutuações de partículas isoladas dominam as flutuações de agregados e levam à suspensão a um comportamento de intensas flutuações não correlacionadas mais semelhantes ao que ocorre em um *random walk* Browniano.

Esta interpretação pode ser dada em termos de uma separação do domínio espacial da suspensão em um domínio com agregados e outro com partículas isoladas. O equivalente ao número de Péclet dos agregados é dado por

$$Pe_a = \frac{U_A R_A}{D_A} \quad (6.101)$$

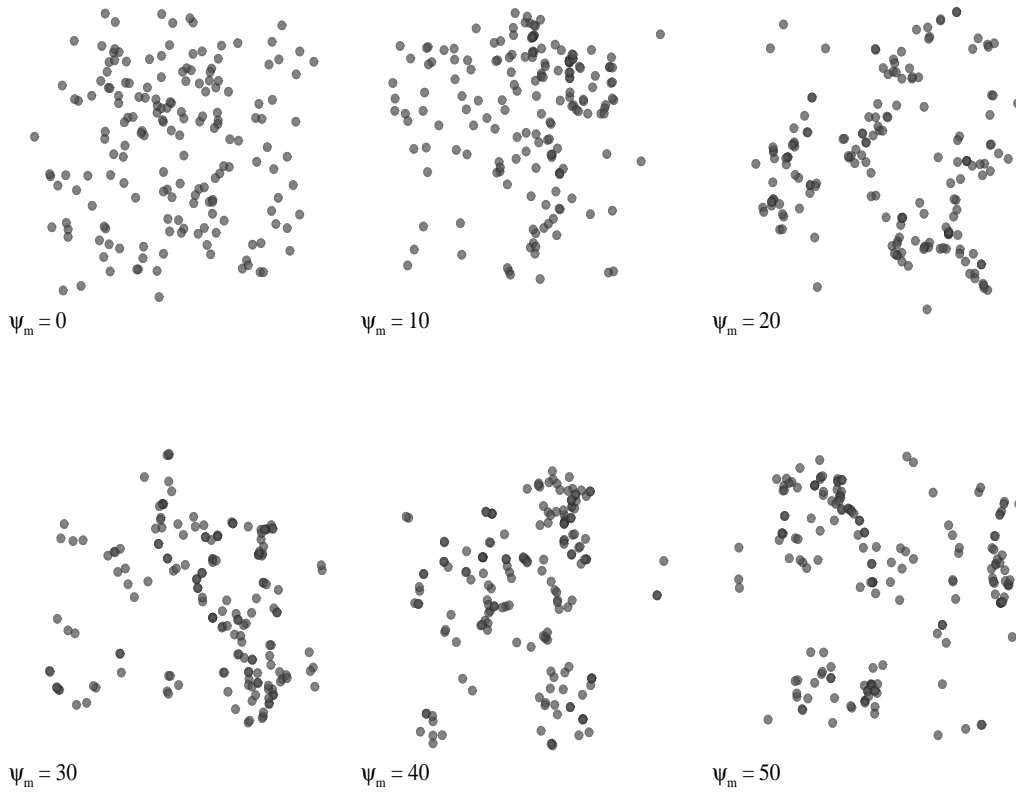


Figura 6.27: Estruturas típicas formadas no interior da suspensão após uma longa evolução temporal de $200a/U_s$, para uma fração volumétrica $\phi = 0.03$ considerando diferentes intensidades de ψ_m

em que U_A denota uma escala típica para a velocidade média do agregado, que pode ser dada em termos da velocidade média de sedimentação do agregado, que como vista anteriormente é muito maior que a velocidade de sedimentação de Stokes de uma única partícula isolada, R_A denota o raio de giração do agregado, que também é muito maior do que o raio de uma única partícula isolada e D_A seria o análogo ao coeficiente de difusão Browniano associado ao movimento do agregado como um conjunto único, interpretado nesse contexto como uma esfera imaginária englobando todas as partículas pertencentes ao agregado. Apenas para podermos facilitar a interpretação do comportamento observado na figura (6.26), definimos este coeficiente D_A de modo análogo ao coeficiente de Stokes-Einstein associado à intensidade de flutuações Brownianas, dado por $D_A = k_B T / 6\pi\eta R_A$, ou seja, como $R_A \gg a$, em que a denota o raio de uma partícula isolada, temos que $D_A \ll \mathcal{D}$, em que \mathcal{D} representa o mesmo coeficiente para uma partícula isolada. Deste modo temos que $Pe_A \gg Pe$.

A afirmação de que $Pe_A \gg Pe$ é equivalente a dizer que as flutuações de velocidade no domínio de agregados serão muito menores que aquelas associadas ao comportamento dinâmico de partículas isoladas da suspensão, ou seja, o domínio de agregados na suspensão pouco contribuirá para análise das flutuações de velocidade da suspensão como um todo, de modo que a partir de valores de $\psi_m \geq 20$, como a topologia da suspensão se mantém aproximadamente constante, o fator determinante que influenciará o decaimento da função autocorrelação normalizada de flutuações de velocidade na direção da gravidade será justamente a intensidade de flutuações induzidas tanto por interações hidrodinâmicas quanto magnéticas de partículas isoladas não pertencentes à nenhum tipo de agregado.

A fim de reforçar o comportamento observado na figura (6.26), o comportamento do tempo de correlação em função do parâmetro ψ_m para as três direções do espaço é mostrado na figura (6.28). É possível perceber nitidamente a mudança no comportamento do tempo de correlação para um valor crítico de ψ_m a partir do qual o aspecto microestrutural deixa de sofrer grandes mudanças em termos de números de agregados e número médio de partículas por agregado. Para valores muito altos de ψ_m um aumento na intensidade das interações magnéticas gera maiores flutuações de velocidade nas partículas isoladas, o que gera um comportamento mais semelhante ao de flutuações isotrópicas como ocorrem no caso de movimento browniano.

Sabe-se que a função autocorrelação normalizada das flutuações de velocidade de sistemas particulados costuma ser muito bem representada por um decaimento exponencial com a forma

$$R(t) = e^{-t/\tau_c} \quad (6.102)$$

esta representação é válida para sistemas particulados na presença apenas de interações hidrodinâmicas, conforme pode ser observado na figura (6.29).

Apesar de haver um ligeiro platô conforme o tempo tende à zero no caso da função autocorrelação para $\psi_m = 0$ na direção perpendicular à gravidade, a função exponencial descrita em (6.102) com τ_c determinado pela equação (6.100) consegue representar bem o comportamento de $R(t)$. A figura (6.30) ilustra o comportamento obtido para $\psi_m = 20$ mostrando que a inclusão de interações magnéticas no sistema não quebra a característica de decorrelação das flutuações de velocidade ao longo do tempo, apesar de alterar a memória do sistema através do tempo de correlação deste.

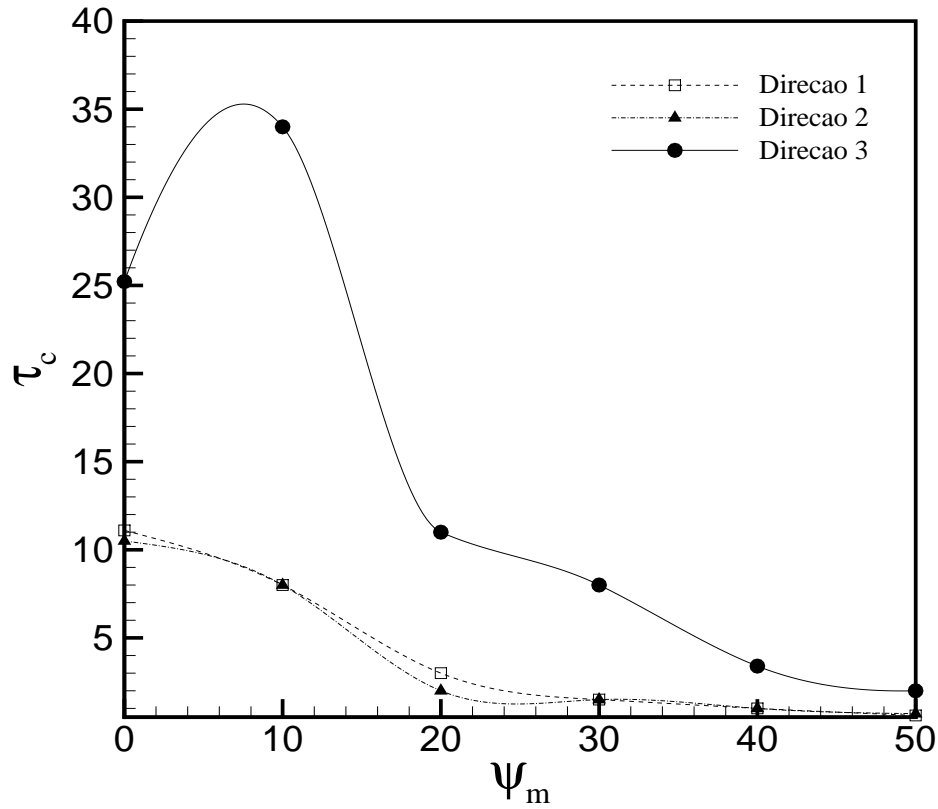


Figura 6.28: Variação do tempo de correlação do sistema na presença de interações magnéticas em função de α^* para as três direções do espaço

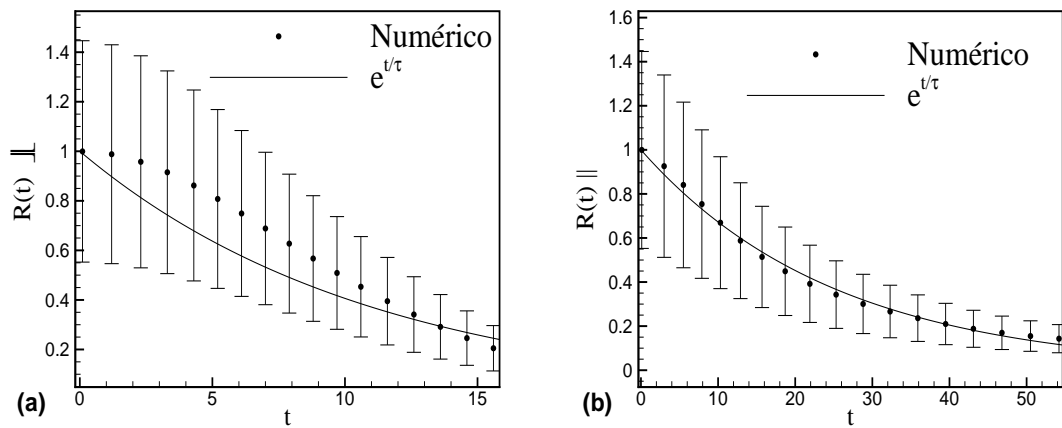


Figura 6.29: Fit com decaimento exponencial da função autocorrelação para $\psi_m = 0$

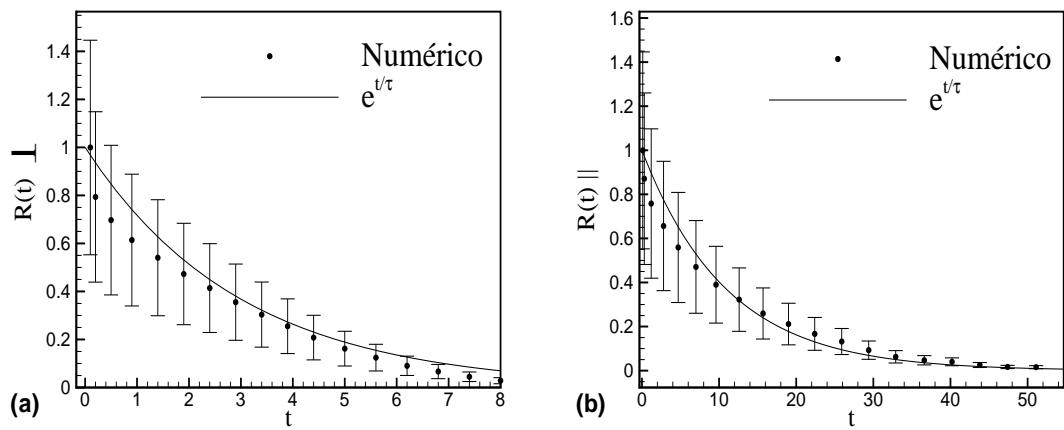


Figura 6.30: Fit com decaimento exponencial da função autocorrelação para $\psi_m = 20$

6.6 Magnetização de equilíbrio com interações hidrodinâmicas

Uma das propriedades mais importantes de suspensões magnéticas consiste na magnetização de equilíbrio da suspensão. Em praticamente todas as aplicações práticas associadas ao escoamento de fluidos magnéticos, este se dá na presença de um campo externo aplicado na suspensão e é justamente a capacidade que os momentos de dipolo das partículas que constituem a suspensão possuem em se alinhar na direção desse campo que confere uma série de propriedades interessantes para que estes fluidos possam ser aplicados nos mais diversos contextos da área de tecnologia. Esta capacidade de alinhamento de dipolos individuais das partículas na direção preferencial de um campo é mensurada pela magnetização da suspensão.

A palavra *equilíbrio* no termo *magnetização de equilíbrio* se refere à média do alinhamento dos momentos de dipolo das partículas na direção de um campo externo aplicado no caso em que o fluido base encontra-se em repouso. No caso de um fluido em movimento a magnetização da suspensão é alterada também em função da vorticidade do fluido que altera a velocidade angular de uma partícula fluida infinitesimal do contínuo, além de depender da velocidade angular interna das próprias partículas sólidas que constituem a suspensão magnética. A figura (6.31) exemplifica como o escoamento pode alterar a orientação dos momentos de dipolo das partículas através da vorticidade e do próprio fenômeno convectivo que translada as partículas para regiões mais próximas ou mais afastadas de um campo externo.

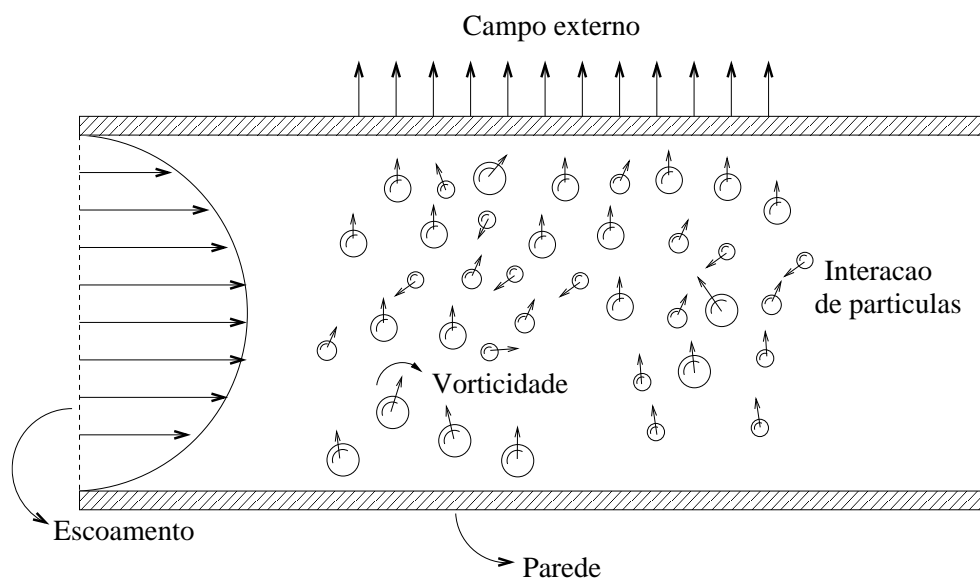


Figura 6.31: Desenho esquemático de como o escoamento influencia a magnetização da suspensão

Esta velocidade angular interna (ou de *spin*) pode ser obtida através da solução da equação do momento angular, conforme descrito em detalhes por Cunha (2012). Ainda assim, mesmo que o fluido esteja se movimentando e que a solução da equação evolutiva da magnetização deste seja necessária para a determinação do campo de magnetização da suspensão, um modelo da magnetização de equilíbrio desta pode servir como uma condição inicial do campo de magnetização em função de parâmetros físicos importantes da suspensão.

Nesta seção é feito um estudo detalhado de como parâmetros ligados à microhidrodinâmica da suspensão influenciam o comportamento da magnetização de equilíbrio. Os parâmetros físicos geralmente utilizados em estudos teóricos que fornecem expressões para modelar o comportamento da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas se baseiam em funções do tipo

$$\frac{M_0}{M_d} = f(\phi, \alpha), \quad (6.103)$$

em que M_0 denota a magnetização de equilíbrio da suspensão e M_d a magnetização do material sólido que compõe as partículas. Na presente seção será mostrado que uma função mais geral para descrever o comportamento da magnetização de equilíbrio, incluindo efeitos hidrodinâmicos na microestrutura da suspensão pode ser expressa por

$$\frac{M_0}{M_d} = f(\phi, \alpha, Pe). \quad (6.104)$$

Na realidade os modelos teóricos conhecidos para a predição da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas, Langevin e Ivanov (2001), são válidos para suspensões coloidais no limite assintótico em que $Pe \rightarrow 0$. Em um trabalho recente de cunho teórico Berkov, Iskakova e Zubarev (2009) apontaram para a necessidade da inclusão de forças por interações hidrodinâmicas entre as partículas para uma descrição mais detalhada do comportamento microestrutural de suspensões magnéticas. No presente trabalho a influência do número de Péclet no valor da magnetização de equilíbrio é investigada. Dessa forma é possível propor um novo modelo mais abrangente, válido não só para suspensões coloidais de nanopartículas, mas também para suspensões não-coloidais de partículas micrométricas, levando em consideração efeitos de interação hidrodinâmica entre as partículas.

Antes da análise física do comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão em função dos parâmetros desejados é importante realizar um teste de convergência desta propriedade, agora na presença de interações magnéticas combinadas com interações hidrodinâmicas de modo simultâneo. Para tanto foram realizadas diversas simulações para diferentes números de partícula, mantendo uma fração volumétrica

constante e igual a 1%, para um número de Péclet fixo e igual a 0.4 e para valores de $\alpha = \alpha^* = 1$. Nestas condições é possível observar que a magnetização de equilíbrio satura rapidamente e assume um valor constante para valores de $N \geq 300$. Todas as simulações feitas a partir deste momento consideram um número de partículas $N > 300$, a fim de garantir a convergência da propriedade estudada.

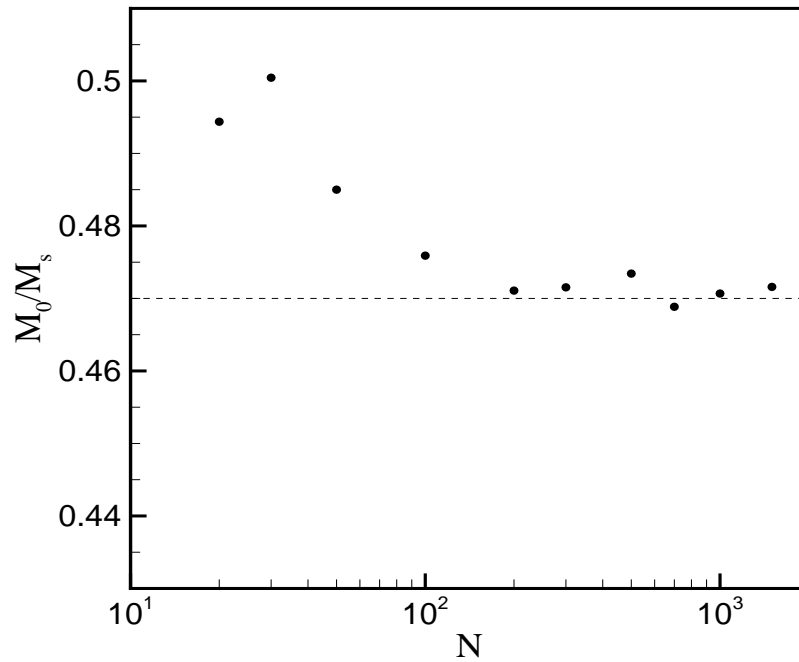


Figura 6.32: Convergência da magnetização de equilíbrio da suspensão considerando agora a presença de interações hidrodinâmicas e magnéticas. O gráfico mostra a variação dos valores médios de magnetização em função do número de partículas para $\phi = 0.01$, 10 realizações simultâneas, $\alpha = \alpha^* = 1$ e $Pe = 0.4$

Como resultados importantes de validação do código, as figuras (6.33) e (6.34) ilustram o comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão determinada numericamente em função de α e ϕ e sua comparação com os modelos teóricos existentes na literatura no limite assintótico de $Pe \rightarrow 0$, que caracteriza uma suspensão coloidal magnética, no qual os modelos são válidos.

Pela figura (6.33) é possível observar excelente concordância entre os valores numéricos e os valores obtidos através dos modelos teóricos. É possível notar que para valores mais altos de ϕ , no regime em que $\alpha \sim 1$ os modelos teóricos passam a apresentar comportamentos diferentes devido à consideração do efeito de interações entre partículas. Este comportamento só é observado em regimes nos quais as forças associadas à interação

campo externo-partícula são da mesma ordem de magnitude das forças brownianas. Para valores de $\alpha \gg 1$ o campo externo domina qualquer tipo de interação entre partículas e os modelos $O(\phi)$, $O(\phi^2)$ e $O(\phi^3)$ entram em colapso. Este fato pode ser observado nos gráficos da figura (6.34). Em todas as faixas de ϕ e α os valores numéricos possuem boa concordância com os modelos teóricos válidos para $Pe \ll 1$. O comportamento apresentado nas figuras (6.33) e (6.34) serve como etapa de validação do código computacional escrito, pois mostra que este consegue capturar com boa precisão o efeito de todos os detalhes associados à micromecânica de uma suspensão magnética no comportamento de uma propriedade média importante da suspensão associado ao efeito de rotação de partículas na direção de um campo externo aplicado.

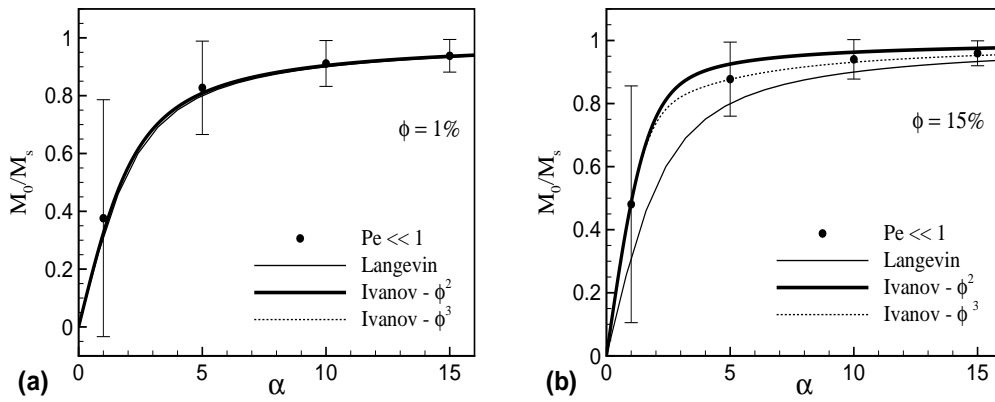


Figura 6.33: Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de α para $\phi = 0.01$ (a) e $\phi = 0.15$ (b).

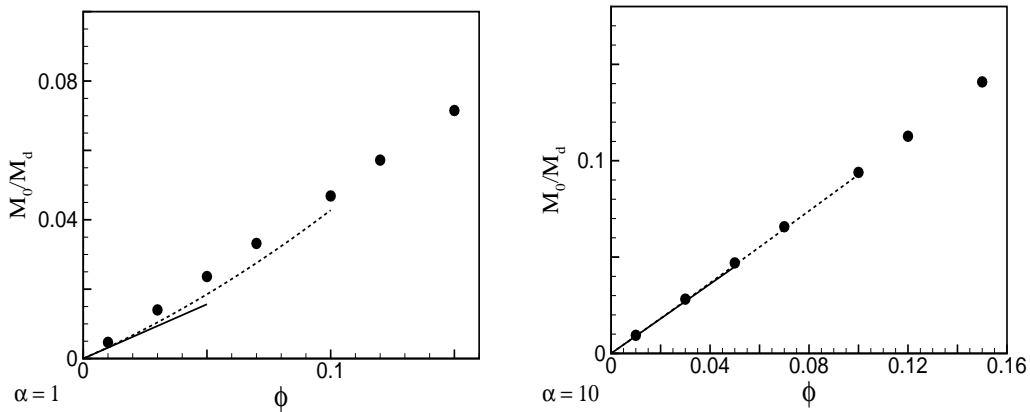


Figura 6.34: Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de ϕ para $\alpha = 1$ (a) e $\alpha = 10$ (b). A linha contínua denota o modelo de Langevin, a linha pontilhada a solução $O(\phi^3)$ de Ivanov et al. (2001) e os círculos preenchidos representam os valores numéricos para $Pe \rightarrow 0$.

A fim de observar como a hidrodinâmica influencia o comportamento da magne-

tização da suspensão, foi feito um estudo da influência do número de Péclet nos valores de M_0 . No estudo da física de suspensões magnéticas, geralmente o parâmetro físico que relaciona duas escalas de tempo considerado é o parâmetro α . Este parâmetro relaciona uma escala de tempo magnética associada ao campo externo e uma escala de tempo associada ao coeficiente de difusão browniano. Nenhuma informação em relação às escalas de tempo de difusão de quantidade de movimento, associada à hidrodinâmica da suspensão é levada em conta nos modelos de magnetização existentes. O termo α como aparece originalmente é na verdade uma relação entre a energia de um campo magnético externo e a energia das flutuações brownianas, de modo que

$$\alpha = \frac{\mu_0 m H}{k_B T} = \frac{\text{Energia - campo magnético}}{\text{Energia - flutuações brownianas}} \quad [\text{J}]/[\text{J}], \quad (6.105)$$

através de uma simples análise dimensional dos termos expressos na equação (6.105) é possível escrever escalas de tempo magnéticas e brownianas em termos das quantidades expressas na definição do parâmetro α como

$$\tau_m = \sqrt{\frac{\rho a^5}{\mu_0 m H}} \quad (6.106)$$

e

$$\tau_b = \sqrt{\frac{\rho a^5}{k_B T}}. \quad (6.107)$$

Em que τ_m representa uma escala de tempo típica magnética e τ_b uma escala de tempo típica Browniana. Desta forma temos que

$$\alpha = \frac{\tau_b^2}{\tau_m^2} = \frac{\mu_0 m H}{k_B T}. \quad (6.108)$$

No estudo de suspensões coloidais magnéticas, as escalas de tempo Brownianas são muito pequenas e por vezes da mesma ordem das escalas de tempo magnéticas, dessa forma é interessante nesse estudo contabilizar a influência do parâmetro α no comportamento médio da suspensão, pois quando este é $O(1)$ o movimento Browniano ao qual as nanopartículas estão submetidas e que tenta randomizar a distribuição de dipolos das partículas compete com a tentativa do campo externo de alinhar estas em uma direção preferencial. Quando o tempo magnético é muito pequeno, inclusive muito menor que o tempo associado aos *kicks* Brownianos, todas as partículas se alinham rapidamente na direção do campo e o comportamento da suspensão atinge valores de saturação rapidamente, neste limite assintótico as interações entre as partículas não contribuem para a dinâmica da evolução da magnetização de equilíbrio da suspensão.

Entretanto um fator que não é considerado no parâmetro α é justamente o efeito hidrodinâmico. Quando o número de Péclet aumenta, os efeitos Brownianos na suspensão

diminuem, pois as escalas de tempo de difusão viscosa de quantidade de movimento por parte do fluido começam a competir com as escalas de tempo Brownianas e para valores de $Pe > 1$ o tempo de difusão de quantidade de movimento por ação da viscosidade passa a ser menor que o tempo de difusão Browniana.

A fim de investigar a influência da hidrodinâmica na suspensão foi fixada uma fração volumétrica de partículas igual a $\phi = 0.01$ e um valor do parâmetro $\alpha = \alpha^* = 1$ e para esta condição o número de Péclet foi variado do limite $Pe \rightarrow 0$ até $Pe = 1$. Este gráfico é mostrado na figura (6.35).

É possível observar um desvio significativo da condição de $Pe \rightarrow 0$ conforme o número de Péclet aumenta para valores próximos de 1. Esta dinâmica não é considerada em nenhum modelo teórico existente atualmente, pois todos possuem enfoque em suspensões coloidais. Para valores de $Pe \ll 1$ é possível notar uma variação linear da magnetização de equilíbrio da suspensão em função deste. Conforme o número de Péclet aumenta, outras correções $O(Pe^2)$ e $O(Pe^3)$ são necessárias para ajustar o comportamento da magnetização em função de Pe .

Percebe-se também grande variação no valor da magnetização para números de Péclet variando entre zero e 1 e uma tendência de saturação desta propriedade para $Pe \geq 1$. Esse fato é particularmente interessante, pois indica que a adimensionalização utilizada na presente formulação apresenta uma distinção clara entre regimes coloidais e não coloidais através do número de Péclet unitário como sendo o divisor exato do comportamento da propriedade de transporte conhecida por magnetização para suspensões coloidais e não coloidais.

A principal contribuição do presente trabalho na análise de modelos de magnetização consiste em mostrar que a metodologia de simulação numérica desenvolvida ao longo desta tese é confiável e fornece informações consistentes com o que se conhece na atual literatura científica no que diz respeito ao comportamento da magnetização de equilíbrio de suspensões magnéticas coloidais. Além disso através de simulações computacionais foi possível ir além e incluir o efeito do número de Péclet no comportamento desta propriedade de transporte. Desta forma podemos estudar tanto suspensões coloidais de nano partículas quanto suspensões não coloidais de micropartículas.

Além de podermos analisar o comportamento de propriedades de transporte de suspensões magnéticas utilizando a presente metodologia, a comparação entre os mo-

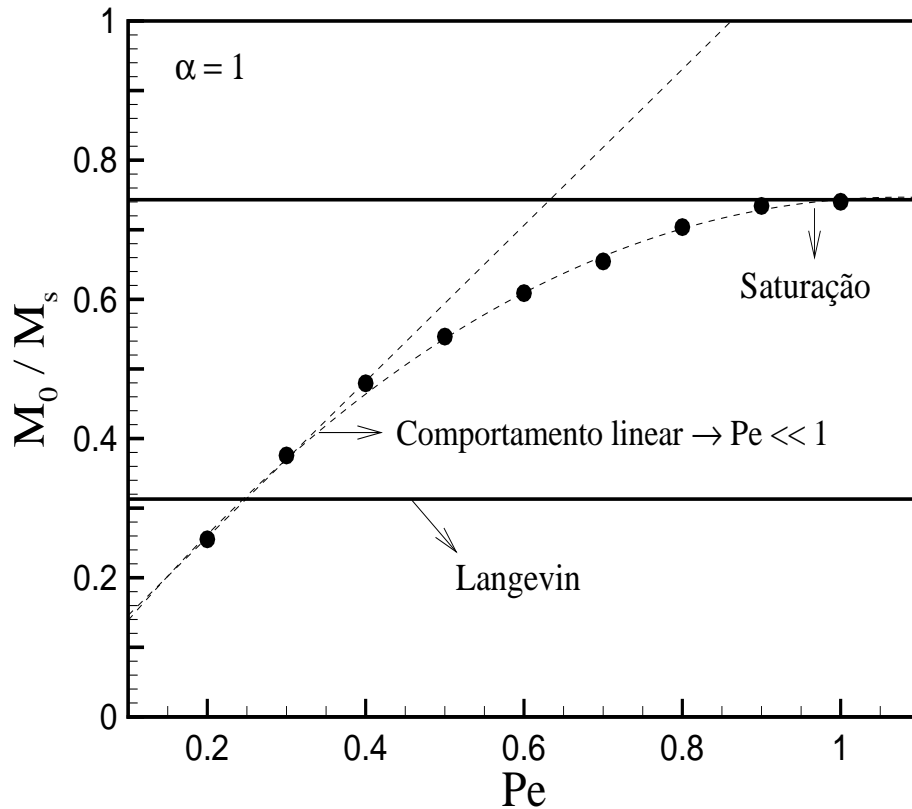


Figura 6.35: Magnetização de equilíbrio da suspensão em função de Pe para $\alpha = \alpha^* = 1$ e $\phi = 0.01$.

delos teóricos disponíveis na literatura e o comportamento previsto pelas simulações computacionais desenvolvidas ao longo deste trabalho serve como validação do código, que poderá no futuro ser utilizado para explorar outros fenômenos físicos associados à microhidrodinâmica e micromecânica de suspensões magnéticas. Um estudo de caso interessante consiste por exemplo no desenvolvimento de um modelo aproximado de leito fluidizado magnético, que será discutido na próxima seção.

6.7 Estabilização de leitos fluidizados magnéticos - um estudo de caso

Como um estudo de caso de aplicação da metodologia desenvolvida no presente trabalho, um modelo aproximado de um leito fluidizado magnético foi definido através da subtração da velocidade de cada partícula em cada instante de tempo da velocidade

média da suspensão naquele instante, de modo que

$$\mathbf{u}_i^N = \mathbf{u}_i^A - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i^A, \quad (6.109)$$

em que \mathbf{u}_i^N denota a nova velocidade de uma partícula i qualquer da suspensão e \mathbf{u}_i^A denota a velocidade da mesma partícula calculada através do procedimento descrito anteriormente. Esta subtração equivale à determinação da velocidade de cada partícula da suspensão vista por um observador móvel que se desloca com a velocidade média da suspensão. Através deste procedimento é possível observar um comportamento flutuante típico de um leito fluidizado, no qual as flutuações são induzidas por interações hidrodinâmicas e magnéticas. A aplicação da equação (6.109) ao código desenvolvido no presente trabalho leva a um *Modelo de Leito Fluidizado Magnético*, que no presente contexto será referido como **MLFM**.

É importante frisar que este é um modelo aproximado de leito fluidizado magnético, pois o sistema possui inércia de partícula nula ($St = 0$), diferentemente de um leito fluidizado comum do tipo gás-sólido, no qual $\rho_s/\rho_f \gg 1$, em que ρ_s denota a massa específica do sólido e ρ_f a massa específica do fluido, o que leva a um sistema com alta inércia de partícula no qual a física é regida por colisões e as flutuações são induzidas por instabilidades do escoamento ascendente que tenta fluidizar o leito. Ainda assim alguns aspectos fenomenológicos podem ser estudados utilizando este modelo.

Um problema interessante a ser abordado envolvendo leitos fluidizados magnéticos consiste na estabilização do leito contra a formação de vazios e atenuação das flutuações transversais de velocidade devido ao efeito de um campo externo aplicado na direção de fluidização do leito. Rosensweig (1985) comenta que observações experimentais indicam esta atenuação de flutuações de velocidades na direção perpendicular à de fluidização devido ao efeito de um campo externo aplicado na direção desta. Paralelamente Sobral, Cunha e Gontijo (2013) mostraram através de uma análise de estabilidade linear em um modelo 1D que de fato existe essa tendência de estabilização do leito devido à interação entre partículas magnéticas e um campo externo aplicado e que esta estabilização é máxima quando o campo é aplicado na direção de fluidização.

Do ponto de vista físico as instabilidades em leitos fluidizados são originárias devido ao choque de partículas, ao efeito da pressão de partícula e às esteiras formadas pela passagem do fluido em torno das partículas suspensas por este. A estabilização do leito é importante para que o processo de fluidização seja eficiente, garantindo sistemas de troca de calor e massa mais eficientes para serem utilizados na indústria.

Em um trabalho mais recente Wang et al. (2013) realizaram um estudo teórico baseado em simulações computacionais utilizando a metodologia de Lattice Boltzmann a fim de produzir uma descrição bidimensional de um leito fluidizado líquido-sólido com partículas magnéticas na presença de um campo aplicado. Neste trabalho os autores mostraram que a dinâmica do leito é fortemente influenciada pela formação de longas cadeias alinhadas na direção do campo que quebram a isotropia microestrutural da suspensão. Em outro trabalho Sobral e Cunha (2003) apresentaram uma formulação que indicava uma tendência de estabilização do leito para direções arbitrárias da aplicação de um campo externo, mas este trabalho era restrito à leitos com baixos números de Reynolds de partícula, já que apenas forças viscosas foram consideradas para efeito de interação fluido-partícula. Esta tendência de estabilização do leito através do uso de um campo magnético externo controlável aplicado no domínio da suspensão foi também capturada em trabalhos experimentais de Hristov (1996, 2003 e 2008).

A fim de tentar capturar numericamente a estabilização do leito devido ao efeito do campo foi utilizado o **MLFM** com uma mistura de partículas magnéticas e não magnéticas, variando-se a fração volumétrica de partículas magnéticas ϕ_m para uma dada fração volumétrica de partículas total ϕ . O campo externo foi aplicado sempre na direção de fluidização, que nesse contexto é a própria direção da gravidade. Esta mistura de partículas magnéticas com partículas não magnéticas será chamada de *Suspensão Magnética Fracionada*, ou simplesmente **SMF**. Do ponto de vista numérico esta mistura é feita atribuindo a um determinado percentual de partículas da suspensão um momento de dipolo nulo, o que faz com que estas partículas de dipolo igual a zero não interajam magneticamente com nenhuma outra partícula e nem com o campo externo, seja no contexto de forças ou no contexto de torques. A figura (6.36) ilustra de modo esquemático a ideia da **SMF** aplicada ao contexto do *Modelo de Leito Fluidizado Magnético* como utilizado no presente trabalho, nela é possível observar de modo esquemático a tendência de formação de cadeias na direção do campo aplicado. Uma das teorias para o processo de estabilização do leito seria a de que essas cadeias levam a um menor grau de mobilidade das partículas isoladas na direção perpendicular à da aplicação do campo. Poderia-se pensar inclusive na analogia com a diminuição de flutuações transversais em um escoamento turbulento no interior de um tubo devido à presença de polímeros de alto peso molecular que se estiram na direção do escoamento e inibem as flutuações de velocidade macroscópicas associada ao regime de escoamento na direção perpendicular à do estiramento dessas macromoléculas.

O teste principal desta análise consistiu em variar a fração volumétrica de partículas

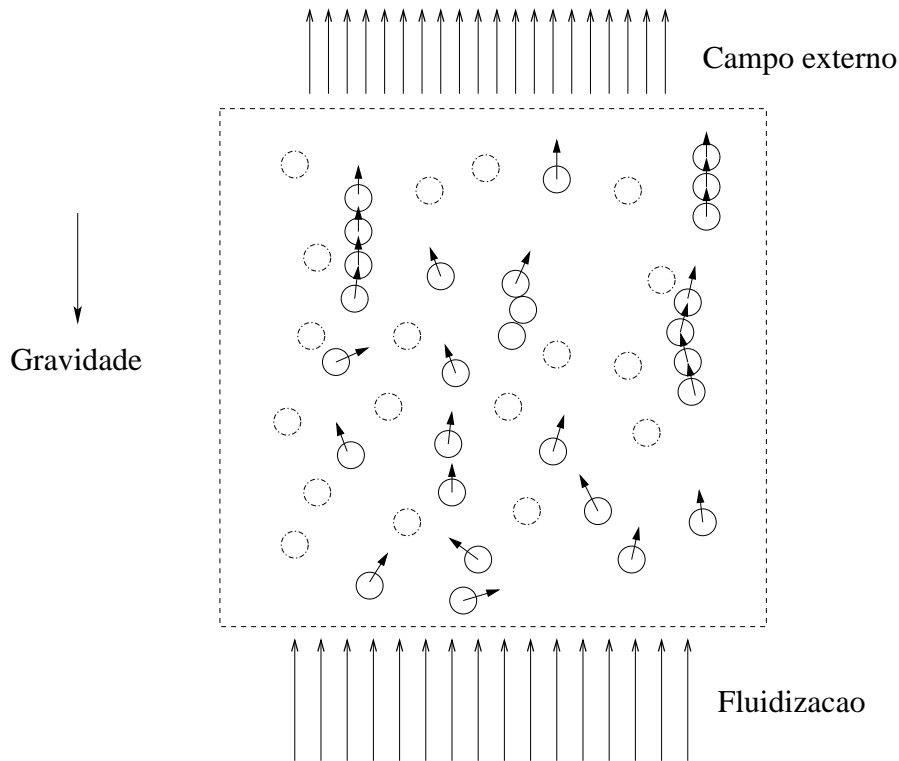


Figura 6.36: Esquema de um modelo de leito fluidizado magnético em uma suspensão magnética fracionada. O campo externo é aplicado na direção de fluidização. As partículas esféricas com contorno traço-ponto denotam partículas não magnéticas enquanto as esferas com contorno contínuo representa as partículas magnéticas e as setas em cima de cada partícula magnética denotam a orientação do momento de dipolo da respectiva partícula.

magnéticas de 0 até um valor de 80% para um valor fixo de $\varphi_m = \psi_m = 1$. Alguns comentários importantes cabem neste momento. A análise de convergência da variância do sistema com o aumento do tamanho deste, mostrada em seções anteriores, indicou uma tendência de saturação desta propriedade estatística na presença de interações magnéticas de decaimento rápido ($1/r^4$) misturadas com interações hidrodinâmicas de decaimento lento ($1/r$). Entretanto esta tendência de saturação ou convergência da variância só foi observada em simulações estáticas (em cima de várias realizações) para suspensões com muitas partículas na lattice central (cerca de 2000) e para altas intensidades do parâmetro de interação magnética ($\psi_m \sim 10^2$).

Testes preliminares indicaram que altas intensidades do parâmetro de interação magnética, tanto entre partículas quanto na interação campo-partícula, levam a um ligeiro aumento da variância do leito fluidizado contendo a suspensão magnética fracionada. Entretanto, para valores de $\varphi_m = \psi_m \sim 1$, as análises indicam uma tendência

de diminuição da variância do sistema como observada na figura (6.37).

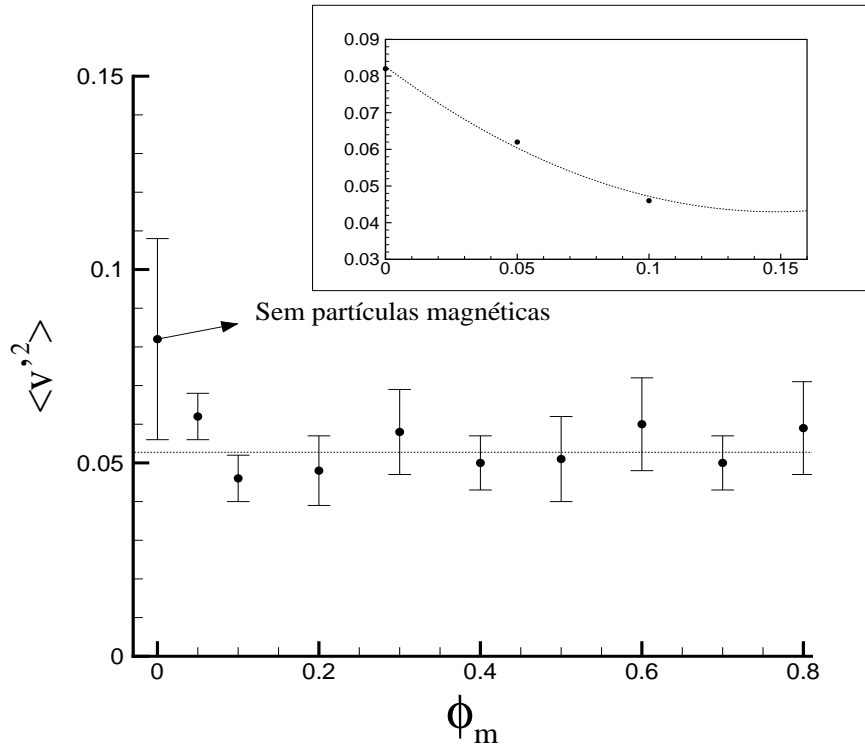


Figura 6.37: Decaimento das flutuações transversais de velocidade devido à adição de partículas magnéticas em um leito fluidizado na presença de um campo magnético.

É importante frisar que os valores de variância analisados nos pontos utilizados para a confecção do gráfico mostrado na figura (6.37) não são rigorosamente convergentes do ponto de vista estatístico quando se pensa em uma saturação desta propriedade com o tamanho do sistema (que para uma dada fração volumétrica é expresso em termos do número de partículas utilizadas na lattice central da simulação). Mesmo assim, a análise é interessante do ponto de vista qualitativo, pois ilustra uma tendência real de estabilização do leito, nas simulações dinâmicas de Langevin realizadas com a presente metodologia.

A tendência geral é que ocorra uma diminuição determinística significativa para frações volumétricas de partículas magnéticas entre $0 < \phi_m < 0.1$ e uma saturação com oscilações de cunho estatístico para valores de $\phi_m > 0.1$. A linha pontilhada na figura (6.37) representa a média dos últimos 8 pontos e quando comparada com o valor da variância para o leito sem partículas magnéticas indica uma diminuição de 35.7% do valor da variância do sistema como um todo. A maior diminuição ocorre para $\phi_m = 0.1$, neste caso a diminuição das flutuações transversais de velocidade do leito chega a 43.9%.

Esta tendência de estabilização de flutuações transversais de velocidade devido a efeitos de anisotropia microestrutural também ocorre em outros contextos. Um exemplo interessante é a diminuição do arrasto em escoamentos turbulentos no interior de dutos cilíndricos através da adição de pequenas concentrações de polímeros de alto peso molecular. Cunha e Andreotti (2007) mostraram experimentalmente diminuições drásticas no fator de atrito de escoamentos turbulentos no interior de tubulações através desta técnica. O mecanismo físico por trás desse efeito consiste no estiramento dessas macromoléculas na direção do escoamento que conseqüentemente inibe flutuações turbulentas (que dissipam energia cinética do escoamento) em outras direções da mesma forma que a tendência de alinhamento das partículas magnéticas na direção do campo inibe flutuações transversais de velocidade do leito como um todo, ajudando no processo de estabilização deste.

A figura (6.38) ilustra esta tendência de alinhamento dos dipolos das partículas na direção do campo.

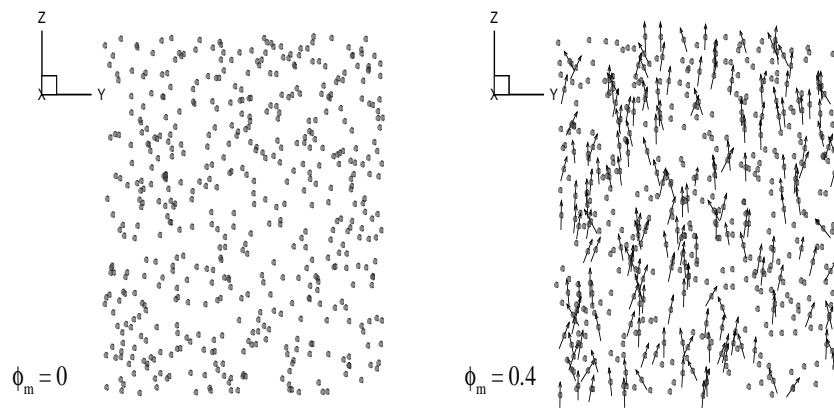


Figura 6.38: Microestrutura para $\phi_m = 0$ e $\phi_m = 0.4$.

É interessante notar que na figura da esquerda em (6.38) não existem partículas magnéticas e na figura da direita 40% das partículas são magnéticas. As setas em cima das partículas denotam os momentos de dipolo unitários destas e só estão presentes nas partículas magnéticas. Ainda que exista uma tendência de alinhamento dos momentos de dipolo na direção do campo, esta é menos pronunciável quando comparada com as figuras que mostram o mesmo efeito do Capítulo 9 da presente tese. Isto ocorre porque no presente capítulo foram adicionadas interações hidrodinâmicas ao problema. Estas interações de longo alcance inibem parcialmente a tendência de formação de longas cadeias bem definidas na direção do campo, mas mesmo assim a tendência agregativa

quando a suspensão é submetida a interações magnéticas (partícula-partícula e campo-partícula) permanece, ainda que menos pronunciável.

É interessante notar que mesmo a microestrutura não sendo alterada de forma significativa, o efeito de interação entre campo e partícula acaba por fornecer menor mobilidade ao sistema como um todo, como se adicionando tensões internas ao volume microscópico do contínuo preenchido pela suspensão. Uma analogia que poderia ser utilizada para explicar esse fenômeno seria a comparação da aplicação de tensões nas extremidades de uma corda em balanço, que rapidamente inibem o movimento ondulatório de vibração desta na direção perpendicular à aplicação da tensão.

Capítulo 7 CONCLUSÕES

7.1 Principais resultados obtidos no presente trabalho

No presente trabalho foi abordado o estudo do comportamento microestrutural de suspensões magnéticas, além de se explorar a relação que conecta a dinâmica microestrutural com o comportamento macroscópico relacionado a escoamentos de suspensões magnéticas. A parte inicial da tese teve como objetivo propor uma nova modelagem das equações governantes que regem o comportamento dos principais campos de grandezas físicas escalares e vetoriais associados à descrição em coordenadas Eulerianas do movimento de suspensões magnéticas vistas como um fluido contínuo equivalente com tensor de tensões modificados.

A nova proposta que modifica o estado da arte no tratamento das equações governantes da Ferrohodinâmica, mostra a influência da equação do momento angular na equação evolutiva da magnetização da suspensão. Em certo sentido o acoplamento entre os vários campos vetoriais importantes na descrição de escoamentos de fluidos magnéticos se torna mais claro a partir da presente discussão. O novo modelo propõe que a equação evolutiva da magnetização deve estar acoplada com uma equação evolutiva da velocidade angular interna, chamada neste trabalho de *spin velocity*, associada a uma velocidade angular média das **partículas** que compõe um ferrofluido. Além disso uma nova constante material surge no processo de dedução da equação do momento angular associada em termos reológicos a um esforço extra que deve ser feito pelo escoamento na tentativa de desorientar as partículas que compõe um fluido magnético da direção de um campo aplicado.

Nesse sentido quatro diferentes mecanismos físicos se combinam para gerar uma viscosidade efetiva de uma suspensão magnética na presença de campo. O primeiro deles consiste na própria viscosidade do fluido base, que nada mais é do que um coeficiente de transporte de quantidade de movimento, associado à flutuações de velocidade em escalas moleculares. O segundo mecanismo que gera uma resistência do fluido ao cisalhamento consiste no aumento da viscosidade do fluido base devido à presença de partículas, que no regime infinitamente diluído leva à célebre expressão da viscosidade de Einstein, que representa um aumento no *stresslet* do fluido devido ao fato de que

o cisalhamento não consegue deformar as partículas rígidas, que por sua vez acabam passando essa deformação ao fluido, o que leva a um aumento da viscosidade do fluido base. Os outros dois mecanismos físicos que levam a um aumento na viscosidade do fluido na presença de um campo magnético estão associados a alteração microestrutural da suspensão devido à aplicação de um campo externo. Com a formação de cadeias na direção de um campo a vorticidade do fluido induzida por um cisalhamento deve fazer um esforço extra para deformar as cadeias de partículas que se formam na direção de um campo externo (viscosidade de Shliomis) e ainda rotacionar estas partículas na direção da vorticidade (*spin-viscosity*). O presente trabalho também mostrou um exemplo de medição desta nova propriedade material, realizado dentro das dependências do Grupo Vortex na Universidade de Brasília.

Devido à grande necessidade de compreender a dinâmica microestrutural de suspensões magnéticas, já que esta microestrutura está fortemente acoplada com fenômenos macroscópicos associados ao escoamento destes fluidos em outras escalas, este trabalho verificou o comportamento físico de partículas que compõem suspensões magnéticas coloidais e não coloidais através de uma abordagem teórico-numérica. Baseado nas leis de Newton do movimento e nas forças que surgem de interações entre partículas em sistemas de muitos corpos, foram estudados essencialmente dois problemas distintos: o problema de duas partículas e o problema de muitos corpos.

No problema de duas partículas, maiores detalhes em relação às forças e torques envolvidos podem ser considerados ainda com um custo computacional modesto e muitas informações físicas importantes podem ser extraídas para explicar certos comportamentos de suspensões diluídas, nas quais as interações dominantes ocorrem entre pares de partículas. Para este problema foi realizado um estudo completo da influência da inércia rotacional das partículas nas taxas de difusão e agregação em suspensões magnéticas diluídas. Foi observado que o simples fato de uma partícula estar livre para girar devido à presença de torques induzidos por interação magnética diminui consideravelmente a tendência que as partículas possuem em formar pequenos dímeros e aumenta a taxa de difusão destas suspensões. Este resultado é em certo sentido surpreendente, pois resalta a importância de se considerar a dinâmica rotacional das partículas para uma correta compreensão da física associada ao comportamento microestrutural de suspensões magnéticas. Em muitos trabalhos anteriores envolvendo simulações de duas partículas, o efeito da rotação da partícula tem sido desprezado com propósitos de simplificação de cálculo, mas se a ideia de estudar o problema utilizando apenas duas partículas consiste na tentativa de obter informações mais precisas

sobre o comportamento de sistemas particulados infinitamente diluídos, negligenciar a solução do momento angular das partículas implica em uma séria perda de informação do comportamento físico de suspensões magnéticas diluídas.

Para o problema de muitos corpos, vários resultados relevantes foram obtidos. Primeiramente foi mostrada uma proposta de um modelo matemático capaz de representar o comportamento de sistemas particulados com interação magnética considerando um pequeno efeito de inércia de partícula. O simples fato de se considerar inércia de partícula trás sérios problemas do ponto de vista computacional do controle das forças envolvidas, principalmente quando as partículas encontram-se muito próximas. Um estudo detalhado do processo de formação de um dímero foi realizado na ausência de interações hidrodinâmicas, apenas na presença de interações magnéticas e dessa forma foi possível calibrar para diferentes números de Stokes e diferentes intensidades do parâmetro de interação magnética uma distância crítica na qual forças atrativas com decaimentos rápidos, como é o caso da força por interação magnética, devem ser *desligadas* a fim de que sejam evitadas singularidades numéricas. Este procedimento do ponto de vista computacional viabiliza o estudo de suspensões magnéticas com pequenos efeitos de inércia de partícula. Ainda dentro deste problema a metodologia proposta foi validada através de uma comparação dos valores da magnetização de equilíbrio da suspensão obtidos numericamente com os valores de modelos teóricos conhecidos na literatura.

Os resultados mais relevantes do presente trabalho surgiram no estudo do problema de muitos corpos com interações hidrodinâmicas e magnéticas. Primeiramente foi possível observar como estas interações magnéticas influenciam a velocidade média de sedimentação da suspensão como um todo. Foi verificado que para uma certa intensidade do parâmetro α^* associado à intensidade das interações magnéticas entre as partículas a velocidade média de sedimentação aumenta com a fração volumétrica de partículas até um dado valor de ϕ . Para valores maiores de ϕ essa dependência funcional ocorre no sentido inverso, fazendo com que a velocidade média diminua com o aumento da fração volumétrica de partículas. A explicação para este comportamento foi mostrada e interpretada de acordo com alterações microestruturais na suspensão associadas à formação de agregados e quebra da randomicidade da estrutura do sistema particulado em função de interações magnéticas.

Outro resultado extremamente relevante foi o comportamento da variância do sistema particulado na presença de interações hidrodinâmicas e magnéticas combinadas.

Foi mostrado no presente trabalho que o problema de divergência da variância para sistemas particulados com interações hidrodinâmicas foi resolvido com a mistura destas interações de decaimento lento com interações de decaimento rápido como as magnéticas. Além disso foi proposta uma expressão para as flutuações de velocidade em sistemas particulados sedimentando na presença de interações magnéticas. Este modelo pode ser estendido para sistemas livres da ação líquida da gravidade para determinação de propriedades médias da suspensão como pressão e viscosidade de partícula.

Finalmente, foi feito um estudo aprofundado na influência do número de Péclet no comportamento da magnetização de equilíbrio da suspensão, que permitiu gerar um novo modelo de magnetização de equilíbrio que para $Pe \rightarrow 0$ reproduz o comportamento do modelo teórico mais avançado da atualidade, de Ivanov (2001), e que para $Pe \neq 0$ gera resultados inéditos. Este modelo pode ser utilizado para prever o comportamento da magnetização de equilíbrio em suspensões magnéticas não coloidais por exemplo.

7.2 Temas a serem abordados em trabalhos futuros

Ao longo do desenvolvimento do presente trabalho conforme as contribuições foram surgindo, algumas dúvidas e questões puderam ser levantadas e nesta seção pretende-se propor sugestões de temas relacionados à esta tese a serem abordados em trabalhos futuros. O primeiro problema que pretende-se explorar em próximos trabalhos consiste em um estudo mais aprofundado do problema de duas partículas. Nesta seção pretendemos investigar ainda o comportamento de coeficientes de autodispersão e dispersão induzida por diferenças de concentração baseado em análises de trajetória, conforme desenvolvido em trabalhos anteriores por Cunha et al. (2008) para um problema semelhante, porém na ausência de torques e inércia de partícula. Além disso deseja-se ainda investigar a influência da condição inicial dos momentos de dipolo das esferas no comportamento do sistema como um todo através da análise dos diagramas de reversibilidade do sistema. Como se sabe, sistemas dinâmicos não-lineares são fortemente influenciados por pequenas variações na condição inicial. Com a possibilidade de simulações utilizando diversas configurações iniciais possíveis tanto para a posição das partículas quanto para a orientação dos momentos de dipolo da suspensão, poderemos também estudar o comportamento da magnetização de equilíbrio para suspensões diluídas $O(\phi^2)$ na presença de interações hidrodinâmicas.

Com relação ao problema de muitos corpos, uma ideia que surgiu recentemente e que será melhor explorada em trabalhos futuros consiste no estudo de convergência da magnetização de equilíbrio em sistemas com interações magnéticas também periódicas. Este trabalho mostrou que a magnetização de equilíbrio da suspensão converge com o tamanho do sistema mesmo com interações magnéticas implementadas em sistemas não periódicos. Existe atualmente uma grande discussão em torno deste tema. Sabe-se que realmente interações de longo alcance com decaimentos da ordem de $1/r$ entre partículas demandam a implementação deste tipo de interação em sistemas periódicos a fim de se recuperar o limite termodinâmico no qual o número de partículas da suspensão tende a infinito. Entretanto para sistemas com decaimentos mais rápidos como $1/r^4$ e $1/r^3$ a discussão com relação à real necessidade da implementação destas interações em sistemas periódicos ainda existe. Pretendemos fazer mais testes de convergência de magnetização com relação ao tamanho do sistema utilizando também um modelo de interações magnéticas periódicas.

Ainda com relação ao problema de muitos corpos pretende-se utilizar o código computacional desenvolvido ao longo desta Tese para estudarmos o comportamento dinâmico de agregados em sedimentação na presença de um campo externo aplicado. Este problema deverá ser abordado também do ponto de vista experimental no laboratório de Reologia e Microhidrodinâmica do Grupo Vortex na Universidade de Brasília.

Referências Bibliográficas

- Acrivos, A., Batchelor, G. K. e Hinch, E. J., 1992, *Longitudinal shear-induced diffusion of spheres in a dilute suspension*, J. Fluid Mech., Vol.240, pp. 651-657.
- Batchelor, G. K., 1967, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Batchelor, G. K., 1972, *Sedimentation in a Dilute Dispersion of Spheres*, J. Fluid Mech., 52, pp. 245-268.
- Batchelor, G. K. e Green, J. T., 1972, *The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field*, J. Fluid Mech., 56, pp. 375.
- Bakuzis, A. F., 1996, *Anisotropia Magnética de Nanopartículas de Fluidos Magnéticos de $MnFe_2O_4$* , Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade de Brasília, Brasília, DF.
- Barnes, H. A., Hutton, J. F., K. e Walters, F. R. S., 1989, *An Introduction to Rheology*, Elsevier Science Publishers Comp. Inc., New York.
- Basset, A. B., 1888, *A Treatise on Hydrodynamics*, Deighton Bell, Cambridge, United Kingdom.
- Beenakker, C. W. J., 1986, *Ewald Sum of the Rotne-Prager Tensor*, J. Chem. Phys., 853, pp. 1581-1582.
- Benes, K., Tong, P. e Ackerson, B. J., 2007, *Sedimentation, Péclet number, and hydrodynamic screening*, Physical Review E, **76**, 056302.
- Bergognoux, L., Ghicini, S., Guazzelli, E. e Hinch, E. J., 2003, *Spreading fronts and fluctuations in sedimentation* Phys. Fluids 15, 1875.
- Berkov, D. V., Iskakova, L. Yu. e Zubarev, A. Yu., 2009, *Theoretical study of the magnetization dynamics of nondilute ferrofluids*, Physical Review E **79**, 021407.

- Berthier, J. e Ricoul, F., 2002, *Numerical Simulation of Ferrofluid Flow Instabilities in a Capillary Tube at Vicinity of a Magnet*, Modeling and Simulation of Microsystems, (www.cr.org), ISBN 0-9708275-7-1.
- Blums, E., Mezulis, A., Maiorov, M. e Kronkalns, G., 1997, *Thermal diffusion of magnetic nanoparticles in ferrocolloids: Experiments on particle separation in vertical columns*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 169 (1997) 220-228.
- Brady, J. F. e Durlofsky, L. J., 1988, *The Sedimentation Rate of Disordered Suspensions*, Phys. Fluids, 31(4), pp. 717-727.
- Caffisch, R. E. e Luke, J. H. C., 1985, *Variance in the Sedimentation Speed of a Suspension*, Phys. Fluids, 283, pp. 759-760.
- Chandrasekharaiah, D.S. e Debnath, L., 1994, *Continuum Mechanics*, Academic Press, Inc.
- Chang, M. H., Chen, C. e Weng, H. C., 2003, *Stability of Ferrofluid Flow Between Concentric Rotating Cylinders with an Axial Magnetic Field*, International Journal of Engineering Science, Vol. 41, pp. 103-121.
- Crosby, A. e Lister, J. R., 2013 *Hydrodynamic diffusion of sedimenting point particles in a vertical shear flow*, Journal of Fluid Mechanics, Vol.730, pp. 699-732.
- 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. e Hinch, E.J., 1996, *Shear-induced dispersion in a dilute suspension of rough spheres*, J. Fluid Mech., Vol.309, pp. 211-223.
- Cunha, F. R., Abade, G. C., Souza, A. J. e Hinch E. J., 2002, *Modeling and Direct Simulation of Velocity Fluctuations and Particle-Velocity Correlations in Sedimentation*, Journals of Fluids Engineering, Vol. 124, pp-957-968.
- Cunha, F. R. e Sobral, Y. D., 2004, *Characterization of the Physical Parameters in a Process of Magnetic Separation and Pressure Driven Flow of Magnetic Fluid*, Physica A, Vol. 343, pp. 36-64.
- Cunha, F.R., Couto, H.L e Marcelino, N.B., 2007, *A Study on Magnetic Convection in a Narrow Rectangular Cavity*, Magnetohydrodynamics Journal , Vol 43, 8.

- Cunha, F. R. e Andreotti, M., 2007, *A Study of the Effect of Polymer Solution in Promoting Friction Reduction in Turbulent Channel Flow*, Journal of Fluids Engineering -Transitions of the ASME (AIP - American Institute of Physics), Vol 129, 491.
- Cunha, F.R., *Notas de Aula do curso de Microhidrodinâmica*, 2010.
- Cunha, F.R., *Notas de Aula do curso de Mecânica dos Meios Contínuos*, 2010.
- Cunha, F.R., Gontijo, R.G. e Sobral, Y.D., 2012, *Symmetry breaking of particle trajectories due to magnetic interactions in a dilute suspension*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol 326, PP. 240-250.
- Cunha, F.R., 2012, *Fundamentos da Hidrodinâmica de Fluidos Magnéticos*, Capítulo de Livro, ISBN: 978-85-85769-49-9, Poli-USP-ABCM, São Paulo, Vol 8 , 257-339, 2012.
- Cunha, F.R., Sobral, Y.D. e Gontijo, R.G., 2013, *Stabilization of concentration waves in fluidized beds of magnetic particles*, Powder Technology, Elsevier, pp 219-229.
- Dabros, T. e van de Ven, T.G.M., 1992, *Surface collisions in a viscous fluid*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol.149, No.2, pp. 493-505.
- Dahler, J. S. e Scriven, L. E., 1963, *Angular Momentum of Continua*, Nature, Vol 192,pp.36-27.
- 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.
- Felderhof, B. U., 2001, *Flow of a ferrofluid down a tube in an oscillating magnetic field*, Physical Review E, Vol. 64.
- Felderhof, B. U., 2005, *Sedimentation of a dilute suspension in low Reynolds number hydrodynamics*, Physica A 348, 16.
- Grant, I. S., Phillips, W. R., 1990, *Electromagnetism*, John Wiley & Sons Inc., Chichester.
- Gontijo, R.G. e Cunha, F.R., 2012, *Experimental Investigation on Thermo-Magnetic Convection Inside Cavities*, J. Nanosci. Nanotechnol., Vol 12, pp. 9198-9207.

- Gontijo, R.G. e Cunha, F.R., 2012, *Magnetic-Induced Migration in a Sedimenting Suspension of Magnetic Spherical Particles*, J. Nanosci. Nanotechnol., Vol 12, pp. 9286-9294.
- Hart, J. E. 2001, *Ferromagnetic rotating Couette flow: the role of magnetic viscosity*, J. Fluid. Mech., Vol. 453, pp-21-38.
- Hasimoto, H., 1959, *On the Periodic Fundamental Solutions of the Stokes Equations and Their Applications to Viscous Flow Past a Cubic Array of Spheres*, J. Fluid Mech., Vol. 5, pp. 317-328.
- Hristov, J. Y., 1996, *Fluidization of ferromagnetic particles in a magnetic field. Part 1: The effect of field orientation on bed stability*, Journal of Powder Technology, Vol. 87, pp. 59-66.
- Hristov, J. Y., 2003, *Expansion scaling and elastic moduli of gas-fluidized magnetizable beds*, Emerging technologies and techniques in porous media, NATO Science Series, 31, Kluwer Academic Publishers, 2003, pp. 477-489.
- Hristov, J. Y., 2008, *Magnetically assisted gas-solid fluidization in a tapered vessel: first report with observations and dimensional analysis*, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 86, pp. 470-492.
- Ivanov, A. O. e Kuznetsova, O. B., 2001, *Magnetic properties of dense ferrofluids: An influence of interparticle correlations*, Physical Review E, Vol. 64, 041405.
- Jansons, K. M., 1983, *Determination of the constitutive equations for a magnetic fluid*, J. Fluid Mech., Vol. 137, pp. 187-216.
- Jeffrey, D.J. e Onishi, Y., 1984, *Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow*, J. Fluid Mech., Vol. 139, pp. 261-290.
- Jeffrey, D.J, 1992, *The calculation of the low Reynolds number resistance functions for two unequal spheres*, Phys. Fluids A, Vol.4, No.1, pp. 16-28.
- Kim, S. e Karrila, S. J., 2005, *Microhydrodynamics - Principles and Selected Applications*, 2005, Dover Edition, ISBN-13: 978-0486442198.
- Kröger, M.m Ilgl, P. e Hessel, S., 2003, *Magnetoviscous model fluids*, 2003, J. Phys. Condens. Matter **15** (2003) S1403S1423
- Koch, D. L. e Shaqfeh, E. S. G., 1991, *Screening in Sedimenting Suspensions*, J. Fluid Mech. 224, 275.

- Ladd, A. J. C., 2002, *Effects of Container Walls on the Velocity Fluctuations of Sedimenting Spheres*, Phys. Rev. Lett. 88, 048301.
- Lacava, Z. G. M., Garcia, V. A. P., Lacava, L. M., Azevedo, R. B., Silva, O., Pellegrini, F., Cuyper e M., Morais, P. C., 2004, *Biodistribution and biocompatibility investigation in magnetoliposome treated mice*, Journal of Spectroscopy.
- Levine, V. e Levine, J., 2003, *Shear-induced diffusion in dilute suspensions of charged colloids*, Soft Materials 1 (2003) 235.
- Lübbe, A. S., Alexiou, C. e Bergemann C., 2001, *Clinical Applications of Magnetic Drug Targeting*, Journal of Surgical Research, Vol. 95, pp. 200-206.
- Luke, J. H. C., 2000, *Decay of velocity fluctuations in a stably stratified suspension*, Phys. Fluids 12, 1619.
- Miranda, J. A., 2001, *Magnetic fluid in a rotating Hele-Shaw cell*, Journal of Magnetism and Magnetic Material, Vol. 226-230, p. 1278.
- Mucha, P.J. e Brenner, M. P., 2003, *Diffusivities and front propagation in sedimentation*, Phys. Fluids 15, 1305.
- Mukhopadhyay, A., Ganguly, R., Sen, S. e Puri, I. K., 2005, *A scaling analysis to characterize thermomagnetic convection*, International Journal of Heat and Mass Transfer. Article in Press.
- Nicolai, H. e Guazzelli, E., 1995, *Effect of the vessel size on the hydrodynamic diffusion of sedimenting spheres*, Phys. Fluids 7, 3.
- Neuringer, J. L., 1966, *Some Viscous Flows of a Saturated Ferrofluid under the Combined Influence of Thermal and Magnetic Field Gradients*, International Journal of Non-linear Mechanics, Vol. 1, pp. 123-137.
- Nitsche, J. M. e Batchelor, G. K., 1997, *Break-up of a falling drop containing dispersed particles*, J. Fluid Mech. 340 161-175.
- Nguyen, N.Q. e Ladd, A. J. C., 2004, *Microstructure in a settling suspension of hard spheres*, Phys. Rev. E 69, 050401 (R).
- Odenbach, S., 2003, *Ferrofluids - Magnetically Controlled Suspensions*, Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, Vol. 217, pp. 171-178.
- Odenbach, S., 2009, *Colloidal Magnetic Fluids: Basics, Development and Application of Ferrofluids*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ISBN: 978-3-540-85386-2

- Osaci, M., Abrudean, C. e Berdie, A., 2007, *Relaxation Times in Magnetic Nanoparticles System and Memory Effects*, 2007, ACTA PHYSICA POLONICA A, Vol. 112, N.6.
- Oseen, C.W., 1910, *Über die Stokessche Formel und über die verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik*, Arkiv för Matematik, Astronomi och Fysik 6, No. 29
- Pao, R. H. F., 1967, *Fluid Dynamics*, Charles E. Merrill Books, Inc., Columbus, Ohio.
- Patel, R., Upadhyay, R. V. e Mehta, R. V., 2003, *Viscosity Measurements of a Ferrofluid: Comparison with Various Hydrodynamics Equations*, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 263, pp. 661-664.
- Raj, K. e Boulton, R. J., 1987, *Ferrofluids - Properties and Applications*, Materials & Desing, Vol. 8, N° 4.
- Raj, K. e Moskwitz, R., 1990, *Commercial Applications os Ferrofluids*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 85, pp. 233-245. Invited Paper.
- Richardson, J. F. e Zaki, W. N., 1954, *Sedimentation and Fluidization: I*, Trans. Inst. Chem. Eng., 3235, pp. 35-52.
- Rinaldi, C. e Zahn, M., 2002, *Effects of Spin Viscosity on Ferrofluid Duct Flow in Alternating and Rotating Magnetic Fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 252, pp. 172-175.
- Rinaldi, C. e Brenner, H., 2002, *Body versus surface forces in continuum mechanics: Is the Maxwell stress tensor a physically objective Cauchy stress?*, Physical Review E, Vol 65.
- Rinaldi, C., Chaves, A., Elboray, S., He, X. e Zahn, M., 2005, *Magnetic fluid Rheology and Flows*, Current opinion on Colloid and Interface Science, Vol. 10, pp-141-157.
- Risbud, S. R., Luo, M., Fréchette, J. e Drazer, G., 2013, *Analysis of the trajectory of a sphere moving through a geometrical constriction*, Phys. Fluids 25, 062001 (2013).
- Rosensweig, R. E., 1985, *Directions in Ferrohydrodynamics*, J. Appl. Phys., Vol. 57, No. 1, pp. 4259-4264.
- Rosensweig, R. E., 1994, *On magnetorheology and electrorheology as states of unsymmetric stress*, J. Rheology, Vol 39, pp. 179-191.
- Rosensweig, R. E., 1997, *Ferrohydrodynamics*, Dover Publications Inc., New York.

- Rotne, J. e Prager, S., 1969, *Variational Treatment of Hydrodynamic Interaction in Polymers*, J. Chem. Phys., 5011, pp. 4831-4837.
- Sangani, A. S. e Acrivos, A., 1982, *Slow Flow Through a Periodic Array of Spheres*, Int. J. Multiphase Flow, 84, pp. 343-360.
- Segre, P. N., Herbolzheimer, E. e Chaikin, P. M., 1997, *Long-range correlations in sedimentation*, Phys. Rev. Lett. 79, 2574.
- Shiliomis, M. I., 1972, *Effective Viscosity of Magnetic Suspensions*, Sov. Phys JETP. Vol. 34, p. 1291.
- Shiliomis, M. I. e Morozov, K. I., 1994, *Negative Viscosity of Ferrofluid under Alternating Magnetic Field*, Phys. Fluids, Vol. 6, pp. 2855-2861.
- Snyder, S. M., Cader, T. e Finlayson, B. A., 2002, *Finite Element Model of Magnetoconvection of a Ferrofluid*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Article in Press.
- Sobral, Y. D. e Cunha, F. R., 2003, *A Stability Analysis of a Magnetic Fluidized Bed*, Journal of Magnetism and Magnetic Material, Vol. 258, p. 464.
- Sobral, Y. D., 2004, *Estabilidade hidrodinâmica e magnética de leitos fluidizados*, Dissertação de Mestrado, Publicação DM-73, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 286 p.
- Sobral, Y. D., Oliveira, T. F. e Cunha, F. R., 2007, *On the unsteady forces during the motion of a sedimenting particle*, Journal of Powder Technology, Vol. 178, pp. 129-141.
- Tangthieng, C., Finlayson, B. A., Maubetsch e J., Cader, T., 1999, *Heat Transfer Enhancement in Ferrofluids Subjected to Steady Magnetic Fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 201, pp. 252-255.
- Truesdell, G. I. e Toupin, R., 1960, *The Classical Field Theories*, Handbuch der Physik III/1 p. 260.
- Voltairas, P. A., Fotiadis, D. I. e Michalis, L. K., 2002, *Hydrodynamics of Magnetic Drug Targeting*, Journal of Biomechanics, Vol. 35, pp. 813-821.
- Wang, Y., Mauri, R. e Acrivos, A., 1996, *The transverse shear-induced liquid and particle tracer diffusivities of a dilute suspension of spheres undergoing a simple shear flow*, J. Fluid Mech., Vol. 327, pp. 255-272.

- Wang, Z., Holm, C. e Müller, H. W., 2003, *Boundary condition effects in the simulation study of equilibrium properties of magnetic dipolar fluids*, J. Chem. Phys, Vol. 119, p. 379.
- Wang, S., Sun, Z., Li, X., Gao, J., Lan, X. e Dong, Q., 2013, *Simulation of flow behavior of particles in liquid-solid fluidized bed with uniform magnetic field*, Powder Technology, Vol. 237, pp. 314-325.
- Zahn, M., 1990, *Ferrohydrodynamic Torque-Driven Flows*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 85, pp. 181-186.
- Zahn, M. e Wainman, P. N., 1993, *Effects of Fluid Convection and Particle Spin on Ferrohydrodynamic Pumping in Traveling Wave Magnetic Fields*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 122, pp. 323-328.
- Zahn, M. e Pioch, L. L., 1999, *Ferrofluid Flows in AC and Traveling Wave Magnetic Fields with Effective Positive, Zero or Negative Dynamic Viscosity*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Vol. 201, pp. 144-148.
- Zarraga, I. E. e Leighton Jr, D. T. 2001, *Shear-Induced Diffusivity in a Dilute Bidisperse Suspension of Hard Spheres*, Journal of Colloid and Interface Science., Vol. 243, pp. 503-514.

APÊNDICES

Este apêndice é baseado no livro de Microhidrodinâmica de Kim e Karrila (2005) e nas notas de aula do curso de Microhidrodinâmica do Professor Francisco Ricardo Cunha realizadas no ano de 2010 na Universidade de Brasília.

O Teorema recíproco de Lorentz

O teorema recíproco de Lorentz, ou teorema recíproco para hidrodinâmica em baixo número de Reynolds, estabelece que se $(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)$ e $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ representam dois campos de escoamentos diferentes que satisfazem as equações de Stokes numa região do fluido V , limitada pela superfície S , então:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{u}^* \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) - \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) \quad (1)$$

Demonstração: Considere um fluido Newtoniano incompressível, desta forma temos que:

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

$$\sigma_{ij}^* = -p^*\delta_{ij} + 2\eta D_{ij}^*, \quad (3)$$

multiplicando a equação (3) por D_{ij} , isto é, tomando o produto escalar duplo do tensor de tensões do escoamento $(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)$ pelo tensor taxa de deformação do escoamento $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$, temos:

$$\sigma_{ij}^* D_{ij} = -p^* D_{ii} + 2\eta D_{ij}^* D_{ij} = 2\eta D_{ij}^* D_{ij}, \quad (4)$$

note que na equação (5) foi utilizada a equação da continuidade para um escoamento incompressível. A equação (5) em notação de Gibbs pode ser escrita como:

$$\boldsymbol{\sigma}^* : \mathbf{D} = 2\eta \mathbf{D}^* : \mathbf{D} \quad (5)$$

e conseqüentemente

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^* = 2\eta \mathbf{D} : \mathbf{D}^*, \quad (6)$$

mas como o tensor \mathbf{D} é simétrico, temos então que:

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^* = \boldsymbol{\sigma}^* : \mathbf{D}, \quad (7)$$

como consequência direta da simetria do tensor de tensões do fluido, temos que

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^* = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^*. \quad (8)$$

Considere agora a seguinte identidade vetorial:

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}^*) = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (9)$$

substituindo a equação (9) em (8) e sabendo da relação (7), chegamos na forma diferencial do teorema da reciprocidade de Lorentz:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{u}^* \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) - \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^*). \quad (10)$$

É importante notar que na ausência de forças de campo $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{0}$, nesse caso a equação (10) é reduzida simplesmente à

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^*). \quad (11)$$

Em algumas situações a representação integral do teorema recíproco é uma ferramenta muito útil. Para deduzir esta equação, considere uma região regular V de um fluido Newtoniano incompressível. A integração em V da equação (10) fornece:

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV - \int_V \mathbf{u}^* \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV = \int_V \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) dV - \int_V \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) dV, \quad (12)$$

aplicando o teorema da divergência no primeiro termo do lado esquerdo e no primeiro termo do lado direito da equação (12), temos:

$$\int_S \mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_V \mathbf{u}^* \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV = \int_S \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_V \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^*) dV, \quad (13)$$

a equação (13) consiste na representação integral do teorema da reciprocidade para escoamentos em baixos números de Reynolds. Novamente, na ausência de forças de campo, temos que a equação (13) é reduzida simplesmente à:

$$\int_S \mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \int_S \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (14)$$

O teorema recíproco em conjunto com a solução fundamental das equações de Stokes constituem a base para a determinação das forças que agem sobre partículas que interagem hidrodinamicamente quando se deslocam em um fluido viscoso. Na verdade o método das reflexões, utilizado para a determinação dos tensores mobilidade e resistência se origina em sua formulação matemática da Lei de Faxén, que por sua vez tem como base a aplicação em conjunto da solução fundamental generalizada baseada em funções de Green e do teorema recíproco de Lorentz, como mostram as próximas seções.

Representação integral de escoamentos em baixo número de Reynolds

Considere a seguinte versão diferencial do teorema recíproco para o caso em que não existem forças de campo:

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0}. \quad (15)$$

Considere agora a seguinte combinação de escoamentos:

- $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma})$ representam a solução do campo de velocidades e do campo de tensões de um escoamento de Stokes arbitrário;
- $(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)$ são respectivamente o campo de velocidades e o campo de tensões de um escoamento em baixo número de Reynolds conhecido, neste caso a própria solução fundamental das equações de Stokes;

Deste modo, ao utilizarmos a versão diferencial do teorema recíproco juntamente à solução fundamental, temos:

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{8\pi} \mathbf{F} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{8\pi\mu} \mathbf{F} \cdot \mathbf{G} \right) = \mathbf{0}. \quad (16)$$

Desejamos agora integrar a equação (16) em todo o volume V de fluido. Consideraremos para tanto duas possibilidades:

1. A singularidade responsável pelo distúrbio no campo de velocidades do fluido, que gera o escoamento não se encontra no interior de V ;
2. A singularidade encontra-se no interior de V ;

No caso 1 a função de (16) é dita regular em V , já que este volume representa uma região simplesmente conexa, em outras palavras podemos interpretar que todo o volume V pode ser reduzido a um ponto sem cortar os contornos físicos existentes. Assim, temos que para o **caso 1**:

$$\int_V \nabla \cdot (\mu \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{G}) dV = \mathbf{0}, \quad (17)$$

utilizando o teorema da divergência na equação (17), temos

$$\int_S \mu \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS + \int_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{G} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \mathbf{0}. \quad (18)$$

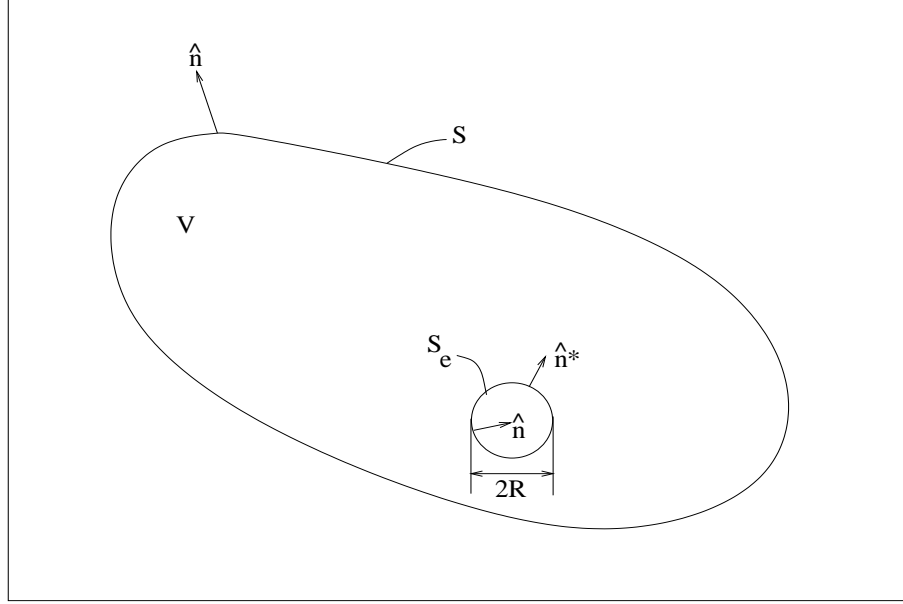


Figura 1: Esquema para o caso 2

Para o **caso 2** considere a figura (1).

Sabe-se que na esfera de raio R as seguintes relações são válidas:

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{I}}{R} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{R^3}, \quad (19)$$

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \frac{6\mathbf{r}\mathbf{r}\mathbf{r}}{R^5}, \quad (20)$$

$$\hat{\mathbf{n}} = -\hat{\mathbf{n}}^* \quad (21)$$

e finalmente

$$\mathbf{r} = R\hat{\mathbf{n}}^* = -R\hat{\mathbf{n}}. \quad (22)$$

Ao considerarmos o volume de fluido $V - V_e$ temos que a equação (16) é regular no volume $V - V_e$, desta forma temos que:

$$\int_{V-V_e} \nabla \cdot (\mu\mathbf{T} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{G}) = \mathbf{0}, \quad (23)$$

utilizando o teorema da divergência na equação (23), temos

$$\int_{S-S_e} \mu\mathbf{T} \cdot \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS + \int_{S-S_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{G} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \mathbf{0}. \quad (24)$$

A avaliação das integrais da equação (24) na superfície de uma esfera que concentra a singularidade fornece a seguinte expressão para o vetor velocidades de uma singularidade em \mathbf{x}_0 em função de relações integrais dos tensores de Green e da solução do escoamento de Stokes dado:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (25)$$

A equação (25) mostra que o valor da velocidade de um singularidade que se move em um fluido viscoso impondo forças sobre o fluido que podem gerar o escoamento ou se sobreporem a um escoamento imposto de modo que o mesmo seja um *creeping flow*, pode ser determinado através do conhecimento do comportamento do escoamento na casca superficial que contém o volume V de fluido que confina a singularidade. O primeiro termo do lado direito da equação (25) é denominado monocamada potencial e está associado aos distúrbios de velocidade em pontos de S , gerados por um ponto de força localizado em \mathbf{x}_0 . Já o segundo termo, denominado dupla camada potencial está associado aos distúrbios de tensão em pontos de S , gerados por um ponto de força em \mathbf{x}_0 . Dizemos que este distúrbio no campo de velocidades é denominado de *Stokeslet*, enquanto que os distúrbios de tensão são chamados de *Stresslet*.

Leis de Faxén

Utilizando a equação (25), temos que para uma partícula rígida não existe velocidade relativa entre pontos localizados sobre sua superfície, diferentemente de uma gota, que se deforma. Deste modo o distúrbio de velocidades em um ponto qualquer do fluido depende apenas da monocamada potencial de Stokeslet, de modo que:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_{S_p} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) dS, \quad (26)$$

em que $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ representa a velocidade de um escoamento imposto sobre a partícula, como um cisalhamento simples por exemplo. Particularizando a equação (26) para um ponto \mathbf{x} localizado sobre a superfície de uma esfera rígida em \mathbf{x}' é possível verificar que a força total na superfície da esfera é dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{3\mu}{2a} \int_{S_p} [\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}') - \mathbf{U}] dS, \quad (27)$$

em que a representa o raio da esfera e \mathbf{U} representa a velocidade de translação da esfera. A equação (27) é chamada de uma forma de representação integral da primeira Lei de Faxén. outra forma de escrever a equação (27), proposta por Batchelor (1972) é dada por:

$$\mathbf{U} = \frac{1}{4\pi a^2} \int_{S_p} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}') dS - \frac{1}{6\pi\mu a} \int_{S_p} \mathbf{t} dS, \quad (28)$$

onde \mathbf{t} representa o vetor de tensões do escoamento avaliado na superfície da esfera. É importante notar que nas equações (27) e (28) aparecem integrais do campo de velocidades do escoamento imposto sobre a superfície da esfera. A fim de considerarmos o efeito do tamanho finito da partícula para que estas integrais possam ser resolvidas, realiza-se uma expansão multipolo para o vetor $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}')$ nas vizinhanças do centro da

esfera $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0)$. Esta expansão é definida da seguinte forma:

$$\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}') = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty|_{x_0} + \frac{1}{2} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \mathbf{u}^\infty|_{x_0} + \dots \quad (29)$$

Substituindo a expansão multipolo dada por (29) na forma de representação integral da primeira Lei de Faxen e resolvendo as integrais na superfície de uma esfera, temos:

$$\mathbf{F} = 6\pi\mu a \left[\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_0) - \mathbf{U} \right], \quad (30)$$

fazendo um procedimento análogo para o torque hidrodinâmico sobre uma esfera rígida temos:

$$\mathbf{T} = 4\pi\mu a^3 \left[\frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{u}^\infty)_{x=x_0} - \boldsymbol{\Omega} \right], \quad (31)$$

em que $\boldsymbol{\Omega}$ representa a velocidade angular da esfera rígida. Considere agora uma esfera transladando com velocidade \mathbf{U} em um fluido em repouso, de modo que o escoamento induzido seja um escoamento de Stokes. Da representação integral para esferas rígidas, fazendo $\mathbf{u}^\infty = 0$, temos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS, \quad (32)$$

da primeira Lei de Faxen, calcula-se o vetor de tensões para uma esfera rígida, dado por:

$$\mathbf{t} = \frac{-3\mu\mathbf{U}}{2a}, \quad (33)$$

substituindo (33) em (32) temos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{3\mathbf{U}}{16\pi a} \cdot \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') dS, \quad (34)$$

realizando uma expansão multipolo para o tensor de Oseen em torno do vetor $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ como

$$\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \mathbf{G}|_{x-x_0} + \frac{1}{2} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \mathbf{G}|_{x-x_0} + \dots \quad (35)$$

substituindo (35) em (34) temos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 6\pi\mu a \mathbf{U} \cdot \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{G}(\mathbf{r}) \quad (36)$$

Monopolo, dipolo e harmônicos de alta ordem

Lembrando da representação integral:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS. \quad (37)$$

Considere agora o cara de um ponto \mathbf{x} longe da singularidade, de modo que $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0| \ll |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$, nesse caso $\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \approx \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Utilizando esta aproximação junto a uma expansão multipolo para \mathbf{G} , temos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{8\pi\mu} \mathbf{G} \cdot \int_S \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS + \frac{1}{8\pi\mu} \nabla \mathbf{G} : \int_S (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS + \dots \quad (38)$$

na equação (38) a primeira integral é um vetor denominado monopolo, a segunda integral representa um tensor de segunda ordem denominado dipolo e o sinal de reticências indica que outros harmônicos de ordem superior podem ser acrescentados à expansão multipolo. Uma forma mais compacta de escrever a equação (38) é dada por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) \approx \frac{-\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}}{8\pi\mu} + \mathbf{D} : \nabla \mathbf{G}, \quad (39)$$

em que:

$$\mathbf{F} = \int_S \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS \quad (40)$$

e

$$\mathbf{D} = \int_S (\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) \mathbf{t}(\mathbf{x}') dS. \quad (41)$$

O tensor \mathbf{D} pode ser interpretado da seguinte forma:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{8\pi\mu} (\mathbf{S} + \mathbf{L}), \quad (42)$$

na equação (42) \mathbf{S} representa a parte simétrica do tensor \mathbf{D} e é chamado de Stresslet, enquanto que \mathbf{L} é a parte antissimétrica de \mathbf{D} . Os tensores de segunda ordem \mathbf{D} e \mathbf{L} podem ser escritos como:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \int_S [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \mathbf{x} + \mathbf{x} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})] dS \quad (43)$$

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2} \int_S [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \mathbf{x} - \mathbf{x} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})] dS = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{T}, \quad (44)$$

em que $\boldsymbol{\epsilon}$ é o tensor isotrópico de terceira ordem associado ao permutador de Levi-Civita. Desta forma a equação (39) pode ser reescrita como:

$$\mathbf{U} \approx \frac{-\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}}{8\pi\mu} + (\mathbf{S} \cdot \nabla) \cdot \frac{\mathbf{G}}{8\pi\mu} + \frac{1}{2} (\mathbf{T} \times \nabla) \cdot \frac{\mathbf{G}}{8\pi\mu}, \quad (45)$$

ao substituirmos no primeiro termo do lado direito da equação (45) o efeito do tamanho finito da partícula, oriundo da expansão multipolo em torno do centro da esfera para o tensor de Oseen, temos que uma aproximação melhor para a equação (45) é dada por:

$$\mathbf{U} \approx \frac{-\mathbf{F}}{8\pi\mu} \cdot \left[1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right] \mathbf{G} + (\mathbf{S} \cdot \nabla) \cdot \frac{\mathbf{G}}{8\pi\mu} + \frac{1}{2} (\mathbf{T} \times \nabla) \cdot \frac{\mathbf{G}}{8\pi\mu}, \quad (46)$$

Interações hidrodinâmicas - o método das reflexões

Considere duas partículas esféricas bidispersas de raios a e b com velocidades U_1 e U_2 , cujos centros estão localizados em \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 respectivamente, conforme a figura (2) esquematiza.

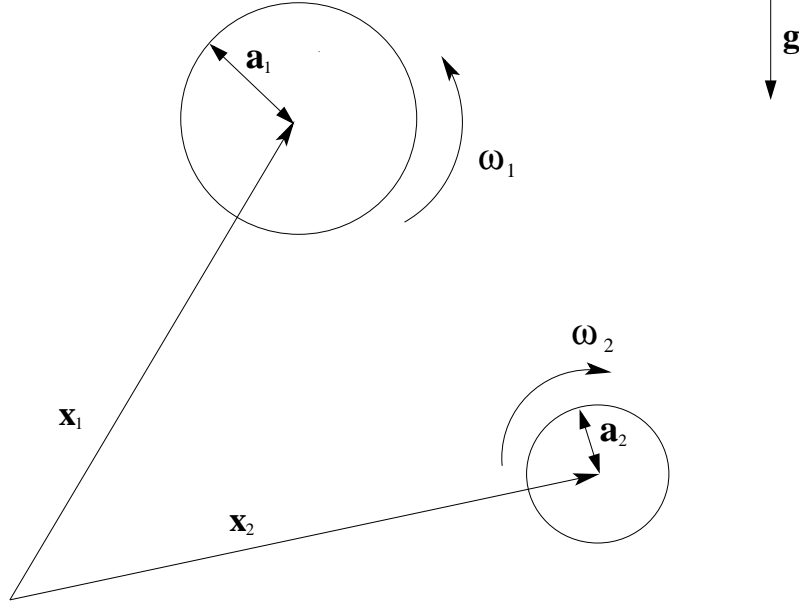


Figura 2: Duas partículas bidispersas

A partícula de raio a ao se movimentar no fluido induz um escoamento em baixo número de Reynolds que perturba o movimento da partícula de raio b e vice-versa. Uma forma eficiente de se computar as interações hidrodinâmicas entre as esferas consiste no método das reflexões. Este método consiste em calcular a velocidade induzida no centro de uma esfera pelo movimento da outra, sendo este propagado pelo tensor de Oseen. O método é iterativo e cada velocidade é refletida gerando forças na outra esfera. Uma exemplificação do método é descrita detalhadamente a seguir.

Primeira reflexão

$$\mathbf{u}_1^0 = -\mathbf{F}_1^0 \cdot \left[1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)}{8\pi\mu}, \quad (47)$$

$$\mathbf{u}_2^0 = -\mathbf{F}_2^0 \cdot \left[1 + \frac{b^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{8\pi\mu}, \quad (48)$$

em que

$$\mathbf{F}_1^0 = 6\pi\mu a (\mathbf{u}^\infty - \mathbf{U}_1) \quad (49)$$

$$\mathbf{F}_2^0 = 6\pi\mu b (\mathbf{u}^\infty - \mathbf{U}_2) \quad (50)$$

$$\mathbf{T}_1^0 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T}_2^0 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{S}_1^0 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{S}_2^0 = \mathbf{0}. \quad (51)$$

A primeira reflexão calcula as velocidades \mathbf{u}_1^0 e \mathbf{u}_2^0 em um ponto qualquer do fluido provocadas pela presença de esferas isoladas que transladam com velocidades \mathbf{U}_1 e \mathbf{U}_2 respectivamente em um meio com velocidade \mathbf{u}^∞ .

Segunda reflexão

$$\mathbf{u}_1^1 = -\mathbf{F}_1^1 \cdot \left[1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)}{8\pi\mu} + \left[\mathbf{S}_1^1 \cdot \nabla + \frac{\mathbf{T}_1^1}{2} \times \nabla \right] \cdot \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)}{8\pi\mu}, \quad (52)$$

$$\mathbf{u}_2^1 = -\mathbf{F}_2^1 \cdot \left[1 + \frac{b^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{8\pi\mu} + \left[\mathbf{S}_2^1 \cdot \nabla + \frac{\mathbf{T}_2^1}{2} \times \nabla \right] \cdot \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{8\pi\mu}, \quad (53)$$

em que

$$\mathbf{F}_1^1 = 6\pi\mu a \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}_2^0 \Big|_{x=x_1} \quad (54)$$

$$\mathbf{F}_2^1 = 6\pi\mu b \left(1 + \frac{b^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}_1^0 \Big|_{x=x_2} \quad (55)$$

$$\mathbf{T}_1^1 = 4\pi\mu a^3 \nabla \times \mathbf{u}_2^0 \Big|_{x=x_1} \quad (56)$$

$$\mathbf{T}_2^1 = 4\pi\mu b^3 \nabla \times \mathbf{u}_1^0 \Big|_{x=x_2} \quad (57)$$

$$\mathbf{S}_1^1 = \frac{20\pi}{3} \mu a^3 \left(1 + \frac{a^2}{10} \nabla^2 \right) \mathbf{D}_2^0 \Big|_{x=x_1} \quad (58)$$

$$\mathbf{S}_2^1 = \frac{20\pi}{3} \mu b^3 \left(1 + \frac{b^2}{10} \nabla^2 \right) \mathbf{D}_1^0 \Big|_{x=x_2} \quad (59)$$

A segunda reflexão calcula as velocidades \mathbf{u}_1^1 e \mathbf{u}_2^1 em um ponto qualquer do fluido provocadas pela presença de uma esfera de raio a que translada com velocidade \mathbf{U}_1 e passa a sentir a presença de outra esfera de raio b que translada com velocidade \mathbf{U}_2 e vice-versa.

Terceira reflexão

$$\mathbf{u}_1^2 = -\mathbf{F}_1^2 \cdot \left[1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)}{8\pi\mu} + \left[\mathbf{S}_1^2 \cdot \nabla + \frac{\mathbf{T}_1^2}{2} \times \nabla \right] \cdot \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)}{8\pi\mu}, \quad (60)$$

$$\mathbf{u}_2^2 = -\mathbf{F}_2^2 \cdot \left[1 + \frac{b^2}{6} \nabla^2 \right] \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{8\pi\mu} + \left[\mathbf{S}_2^2 \cdot \nabla + \frac{\mathbf{T}_2^2}{2} \times \nabla \right] \cdot \frac{\mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{8\pi\mu}, \quad (61)$$

em que

$$\mathbf{F}_1^2 = 6\pi\mu a \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}_2^1 \Big|_{x=x_1} \quad (62)$$

$$\mathbf{F}_2^2 = 6\pi\mu b \left(1 + \frac{b^2}{6} \nabla^2 \right) \mathbf{u}_1^1 \Big|_{x=x_2} \quad (63)$$

$$\mathbf{T}_1^2 = 4\pi\mu a^3 \nabla \times \mathbf{u}_2^1 \Big|_{x=x_1} \quad (64)$$

$$\mathbf{T}_2^2 = 4\pi\mu b^3 \nabla \times \mathbf{u}_1^1 |_{x=x_2} \quad (65)$$

$$\mathbf{S}_1^2 = \frac{20\pi}{3} \mu a^3 \left(1 + \frac{a^2}{10} \nabla^2 \right) \mathbf{D}_2^1 |_{x=x_1} \quad (66)$$

$$\mathbf{S}_2^2 = \frac{20\pi}{3} \mu b^3 \left(1 + \frac{b^2}{10} \nabla^2 \right) \mathbf{D}_1^1 |_{x=x_2} \quad (67)$$

E o método segue até a quarta reflexão. Na verdade este é um método iterativo e serve como uma forma analítica de cálculo das funções que compõe os tensores mobilidade e resistência para interações hidrodinâmicas de longo e curto alcance considerando diversas configurações do movimento de duas partículas. Maiores detalhes sobre a construção dos tensores resistências para determinação de forças e torques por interações hidrodinâmicas para duas partículas são dados em Jeffrey e Onishi (1983).

Cálculo da força magnética sobre a partícula

A força magnética que atua sobre cada nano ou micro partícula que compõe uma suspensão magnética é dada em termos do gradiente de um potencial magnético, que contabiliza um potencial de interação entre momentos de dipolo e um potencial de interação entre um campo externo \mathbf{H} e os momentos de dipolo individuais de cada partícula. Este potencial é dado por

$$\psi_{ij} = \sum_{i \neq j} \frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} [\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j - 3(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})] - \mu_0 m_i H (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}}), \quad (68)$$

na equação (68) o significado de cada termo é dado em termos da seguinte lista:

- \mathbf{d}_i e \mathbf{d}_j \rightarrow são os vetores unitários que representam as direções dos momentos de dipolo individuais das partículas i e j respectivamente;
- m_i e m_j \rightarrow são os módulos dos dipolo individuais das partículas i e j respectivamente;
- $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ \rightarrow é o vetor unitário na direção da linha que une os centros das partículas i e j ;
- r_{ij} \rightarrow é a distância entre os centros das esferas i e j ;
- H \rightarrow representa o módulo de um campo magnético externo aplicado sobre a suspensão magnética;
- $\hat{\mathbf{h}}$ \rightarrow é o vetor unitário na direção do campo externo aplicado;

A força magnética sobre cada partícula é dada por

$$\mathbf{f}_m^i = -\nabla \psi_{ij}, \quad (69)$$

o cálculo desta força exige a determinação dos gradientes de todos os termos expressos na equação (68). Este cálculo é longo e será feito em etapas. Para melhor organização do cálculo os termos da equação (68) serão divididos da seguinte forma:

- **Termo 1** $\rightarrow -\frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j)$;
- **Termo 2** $\rightarrow \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})$;
- **Termo 3** $\rightarrow \mu_0 m_i H (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}})$.

Note que o sinal de $-$ da equação (69) já foi aplicado aos termos da equação (68) e que o símbolo de somatório foi suprimido nos Termos 1,2 e 3 a fim de desdensificar a notação utilizada. O passo seguinte consiste no cálculo dos gradientes dos Termos 1,2 e 3.

Termo 1

$$-\nabla \left[\frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \right] = -\frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \nabla \left(\frac{1}{r_{ij}^3} \right), \quad (70)$$

têm-se que

$$\nabla \left(\frac{1}{r^3} \right) = -\frac{3}{r^4} \nabla r = -\frac{3}{r^5} \mathbf{r}, \quad (71)$$

desta forma o gradiente do Termo 1 é dado por

$$-\nabla \left[\frac{\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \right] = \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^4} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (72)$$

Termo 2

$$\nabla \left[\frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \right) \right] = \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi} \nabla \left[\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right], \quad (73)$$

analisando apenas o termo associado ao gradiente

$$\begin{aligned} \nabla \left[\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right] &= \frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) + \\ &\quad \frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) + \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\frac{1}{r^3} \right), \end{aligned} \quad (74)$$

antes de analisar individualmente cada termo do lado direito da equação (74) é importante ter em mente a seguinte relação que será utilizada constantemente ao longo do desenvolvimento deste cálculo.

Nota:

$$\nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \mathbf{d}_j \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right), \quad (75)$$

e

$$\nabla \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \mathbf{r} \nabla \left(\frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} \nabla \mathbf{r} = \frac{-\mathbf{r}}{r^2} \nabla r + \frac{1}{r} \mathbf{I} = \frac{\mathbf{I}}{r} - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3}, \quad (76)$$

de modo que

$$\nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{I}}{r} - \left(\frac{\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{r}}{r^3} \right) \mathbf{r}, \quad (77)$$

desta forma o gradiente do primeiro termo do lado direito da equação (74) é dado por

$$\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left[\frac{\mathbf{d}_j}{r} - \frac{(\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r}}{r^3} \right] \quad (78)$$

$$\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{r^5} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{r}) \mathbf{d}_j + \frac{1}{r^7} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{r}) (\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r}, \quad (79)$$

substituindo \mathbf{r} por $r\hat{\mathbf{r}}$ têm-se

$$\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{r^4} (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathbf{d}_j + \frac{1}{r^4} (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}, \quad (80)$$

de modo análogo o gradiente do segundo termo do lado direito da equação (74) é dado por

$$\frac{1}{r^3} \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{1}{r^4} (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathbf{d}_i + \frac{1}{r^4} (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}. \quad (81)$$

Resta agora determinar o gradiente do último termo do lado direito da equação (74), este termo é dado por

$$\left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\frac{1}{r^3} \right) = \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\frac{-3}{r^4} \right) \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (82)$$

substituindo \mathbf{r}/r por $\hat{\mathbf{r}}$ têm-se

$$\left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \nabla \left(\frac{1}{r^3} \right) = \frac{-3}{r^4} (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}. \quad (83)$$

Deste modo o gradiente do Termo 2 é dado por

$$\begin{aligned} \nabla \left[\frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} \left(\mathbf{d}_i \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \right) \left(\mathbf{d}_j \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \right) \right] &= \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \mathbf{d}_i] \\ &\quad - \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^4} [5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}}]. \end{aligned} \quad (84)$$

Termo 3

O Termo 3 é de fácil determinação, têm-se

$$\nabla \left[\mu_0 m_i H \left(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}} \right) \right] = \mu_0 m_i H \left(\mathbf{d}_i \cdot \nabla \hat{\mathbf{h}} \right). \quad (85)$$

Expressão final para a força magnética

Somando-se todos os termos têm-se a expressão final para a determinação das forças magnéticas que atuam sobre as partículas em uma suspensão magnética, dada por

$$\mathbf{f}_m^i = \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^4} \left[(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right] + [\mu_0 m_i \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{H}], \quad (86)$$

Cálculo do torque magnético sobre a partícula

A determinação do torque magnético sobre a partícula é feita de maneira diferente. Considere a seguinte operação sobre o termo do potencial magnético associado à interações entre um campo externo e o momento de dipolo individual de uma partícula i :

$$-\mathbf{d}_i \times \nabla_{\mathbf{d}_i} \left[\mu_0 m_i H \left(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}} \right) \right], \quad (87)$$

em que o operador $\nabla_{\mathbf{d}_i}$ denota as derivadas com relação às direções do vetor orientação do momento de dipolo da partícula i . Desta forma a equação (87) pode ser desenvolvida como

$$-\mathbf{d}_i \times \nabla_{\mathbf{d}_i} \left[\mu_0 m_i H \left(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{h}} \right) \right] = -\mathbf{d}_i \times \left(\mu_0 m_i H \hat{\mathbf{h}} \right) = \mu_0 m_i H \left(\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{h}} \right). \quad (88)$$

O termo resultante desta operação é justamente o torque conhecido que atua sobre uma partícula magnética com momento de dipolo com orientação \mathbf{d}_i na presença de um campo magnético de intensidade H e orientação $\hat{\mathbf{h}}$. Desta forma pode-se afirmar que o torquel total sobre uma partícula magnética devido à interações magnéticas entre dipolos de partícula e interações entre um campo externo e o momento de dipolo individual de cada partícula é dado por

$$\mathbf{T}_m^i = -\mathbf{d}_i \times \nabla_{\mathbf{d}_i} \psi_{ij}. \quad (89)$$

Desta forma o torque magnético associado ao termo 1 do potencial ψ_{ij} é dado por

$$\frac{-\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^3} \mathbf{d}_i \times \nabla_{\mathbf{d}_i} (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) = \frac{-\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^3} \mathbf{d}_i \times (\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{I}) = \frac{-\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^3} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j), \quad (90)$$

a expressão para o torque magnético associado ao termo 2 do potencial ψ_{ij} é dada por

$$\frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^3} \mathbf{d}_i \times \nabla_{\mathbf{d}_i} [(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}})] = \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r^3} (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{r}}), \quad (91)$$

desta forma, somando a contribuição de todos os termos do potencial ψ_{ij} no torque magnético total sobre a partícula i , têm-se como resultado final a seguinte expressão:

$$\mathbf{T}_m^i = \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^3} \left[-\frac{1}{3} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j) + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \right] + \left[\mu_0 m_i H (\mathbf{d}_i \times \hat{\mathbf{h}}) \right]. \quad (92)$$

APÊNDICE C: Adimensionalização da equação governante para uma suspensão de partículas magnéticas sem interações hidrodinâmicas

Neste apêndice pretende-se discutir diferentes propostas de adimensionalização da equação governante para representar o movimento de uma partícula magnética no interior da suspensão. Para tanto considere a equação dimensional para uma partícula i qualquer, dada pela segunda lei de Newton por

$$\begin{aligned}
 m \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = & -6\pi\eta a \mathbf{u}_i + \Delta\rho \mathbf{g} \frac{4}{3}\pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\
 & + \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}] \\
 & + (\mu_0 m_i \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{H}) + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda (6\pi\eta a) |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon E b^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r,
 \end{aligned}$$

em que m é a massa da partícula, \mathbf{u}_i a velocidade de uma partícula i , η é a viscosidade do fluido, $\Delta\rho$ é a diferença entre a massa específica da partícula e a massa específica do fluido, a representa o raio da partícula i (no caso as suspensões tratadas são monodispersas, \mathcal{D} é o coeficiente de difusão Browniano (Stokes-Einstein), μ_0 é a permeabilidade magnética do meio, m_i e m_j denotam o módulo dos momentos de dipolo das partículas i e j respectivamente, r_{ij} representa a distância entre os centros das partículas i e j , Λ , \mathcal{Y} e Υ são constantes de calibração das forças de repulsão (lubrificação) e contato (Hertz), ϵ_{ij} representa a distância entre as superfícies das partículas i e j , $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) / r_{ij}$ é um vetor unitário na direção da linha de centro que une as partículas i e j , \mathbf{d}_i e \mathbf{d}_j representam os vetores unitários adimensionais que informam a direção dos momentos de dipolo das partículas i e j $\hat{\mathbf{e}}_r = \hat{\mathbf{r}}_{ij}$ e \mathbf{H} é o vetor campo externo aplicado no domínio da suspensão. É importante comentar que os últimos termos representam forças de lubrificação e contato respectivamente e que ambas só são calculadas para partículas que se encontram próxima, conforme indicado no sub-índice dos somatórios.

A proposta de adimensionalização adotada no presente trabalho considera as seguintes escalas típicas

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_s}, \quad r_{ij}^* = \frac{r_{ij}}{a}, \quad t^* = \frac{t U_s}{a} \quad \text{e} \quad \mathbf{H}^* = \frac{\mathbf{H}}{H_0}, \quad (93)$$

substituindo as escalas propostas em (93) na equação governante, têm-se

$$\begin{aligned} \frac{mU_s^2}{a} \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= -6\pi\eta a U_s \mathbf{u}_i + \Delta\rho g \frac{4}{3} \pi a^3 + 6\pi\eta a \left(\frac{6\mathcal{D}U_s}{a\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4 r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\ &+ \left(\frac{\mu_0 H_0 m_i}{a} \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} \right) + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda (6\pi\eta a) U_s |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{a\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon E b^{1/2} (a\epsilon_{ij})^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned}$$

na equação acima os termos em asteriscos foram suprimidos para evitar densificação desnecessária de simbologia matemática. Dividindo a equação acima por $6\pi\eta a U_s$ obtemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \right) \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= -\mathbf{u}_i + \frac{\Delta\rho g \frac{4}{3} \pi a^3}{6\pi\eta a U_s} + \left(\frac{6\mathcal{D}}{U_s a \delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} \frac{1}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\ &+ \frac{1}{6\pi\eta a^2 U_s} (\mu_0 H_0 m_i \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h}) + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon E b^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned}$$

é importante notar que os termos que apareceram anteriormente nos quais houve multiplicação do raio da partícula a pelo parâmetro ϵ_{ij} foram incorporados às constantes de calibração Λ , \mathcal{Y} e Υ . Utilizando a definição dos números de Stokes e Péclet, temos que a equação acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} St \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= -\mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} \frac{1}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5(\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\ &+ \frac{1}{6\pi\eta a^2 U_s} (\mu_0 H_0 m_i \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h}) + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon E b^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned}$$

em que os parâmetros St e Pe representam os números de Stokes e Péclet, dados respectivamente por

$$St = \left(\frac{mU_s}{6\pi\eta a^2} \right) \quad \text{e} \quad Pe = \frac{U_s a}{\mathcal{D}} \quad (94)$$

Vamos agora trabalhar alguns dos termos que aparecem na equação acima. O primeiro deles é o termos entre parênteses que multiplica a intensidade da força por interações magnéticas partícula-partícula. Este termo representa uma intensidade entre forças de interação magnética entre partículas e forças viscosas e pode ser simplesmente chamado de um parâmetro de interação magnética ψ_m , dado por

$$\psi_m = \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} = \frac{\mu_0 m_i m_j}{8\pi a^5 \eta U_s}, \quad (95)$$

no caso em que $m_i = m_j = m_d$, ou seja, quando todas as partículas da suspensão possuem a mesma intensidade do momento de dipolo, temos

$$\psi_m = \frac{\mu_0 m_d^2}{8\pi a^5 \eta U_s}, \quad (96)$$

é importante falar que este parâmetro, na forma em que aparece só faz sentido físico para suspensões sujeitas ao efeito de sedimentação diferencial por ação gravitacional, já que uma das escalas utilizadas para determiná-lo é a própria velocidade de Stokes de uma partícula isolada. No contexto de suspensões não coloidais, ou seja, quando $Pe \rightarrow \infty$, o parâmetro ψ_m não apresenta nenhuma inconsistência física ou semântica. Entretanto, podemos trabalhar este parâmetro para aplicá-lo a um contexto de simulação de suspensões coloidais da seguinte forma

$$\psi_m = \frac{3\mu_0 m_i m_j}{4\pi a^4} \frac{1}{6\pi\eta a U_s} \frac{k_B T}{k_B T} \frac{H_0}{H_0} = \left(\frac{3m_d}{H_0 4\pi a^3} \right) \left(\frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T} \right) \left(\frac{k_B T}{6\pi\eta a U_s a} \right), \quad (97)$$

utilizando a definição do coeficiente de difusão Browniano de Stokes-Einstein, determinado com base no teorema de equilíbrio flutuação-dissipação, no qual $\mathcal{D} = (k_B T)/(6\pi\eta a)$, e considerando a partícula esférica com volume $v_p = (4\pi a^3)/3$, obtemos

$$\psi_m = \left(\frac{m_d}{H_0 v_p} \right) \left(\frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T} \right) \left(\frac{\mathcal{D}}{U_s a} \right) = \frac{m_d^* \alpha}{Pe}, \quad (98)$$

em que $m_d^* = m_d/(v_p H_0)$ representa o momento de dipolo da partícula adimensionalizado por uma escala associada ao campo externo e o parâmetro $\alpha = (\mu_0 m_d H_0)/(k_B T)$ é um parâmetro clássico utilizado na área de física de suspensões magnéticas para determinar a razão entre a energia de um campo magnético externo aplicado no domínio da suspensão e energias provenientes da agitação térmica molecular do líquido base. Tratamento semelhante pode ser dado ao parâmetro associado à interação campo externo partícula. No caso de uma suspensão não-coloidal, pode-se definir simplesmente um parâmetro φ_m associado a forças produzidas em cima de uma determinada partícula devido a ação de um campo externo e forças de arrasto viscosas em torno da superfície desta enquanto a partícula sedimenta sob a ação da gravidade, dado por

$$\varphi_m = \frac{\mu_0 m_d H_0}{6\pi\eta a^2 U_s}, \quad (99)$$

entretanto no contexto de suspensões coloidais magnéticas, nas quais as forças e torques Brownianos estão presentes, o parâmetro φ_m pode ser manipulado como segue:

$$\varphi_m = \frac{\mu_0 m_d H_0}{6\pi\eta a^2 U_s} \frac{k_B T}{k_B T} = \frac{\mu_0 m_d H_0}{k_B T} \frac{\mathcal{D}}{U_s a} = \frac{\alpha}{Pe}, \quad (100)$$

no caso de uma suspensão não coloidal, na qual $Pe \rightarrow \infty$ podemos utilizar os parâmetros ψ_m e φ_m e desligar as forças Brownianas. Para a simulação de suspensões coloidais

com valores finitos do número de Péclet utiliza-se a combinação dos parâmetros m_d^* , α e Pe , de modo que a equação governante final do movimento da partícula é dada por

$$\begin{aligned}
St \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = & -\mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{Pe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\
& + \sum_{i \neq j} \frac{m_d^* \alpha}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\
& + \frac{\alpha}{Pe} \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{D}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon Eb^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r,
\end{aligned}$$

uma aparente inconsistência física da presente adimensionalização seria o comportamento da suspensão quando $Pe \rightarrow 0$. Note que se multiplicarmos a equação acima por Pe e tomarmos o limite quando $Pe \rightarrow 0$ teríamos que todos os termos tenderiam a zero, com exceção dos termos magnéticos. Entretanto conforme $Pe \rightarrow 0$ as flutuações induzidas por movimento Browniano se intensificam rapidamente de modo que o parâmetro α também tende a zero, pois a energia associada à essas flutuações ($k_B T$ no denominador de α) dominam a energia de um campo externo aplicado ($\mu_0 m_d H_0$ no numerador do parâmetro α). Como o termo associado à forças Brownianas escalaria com $Pe^{1/2}$ este termo vai para zero de forma muito mais lenta que os outros, de modo que as forças Brownianas seriam superiores à todas as outras, o que faz sentido do ponto de vista físico, mostrando que a adimensionalização utilizada neste trabalho é fisicamente consistente. É importante notar ainda que o termo $\delta\tau$ utilizado na modelagem das forças Brownianas representa uma escala de tempo típica associada à flutuações induzidas por movimento Browniano e deve ser proporcional ao número de Péclet da suspensão, que nada mais é do que uma escala de tempo de difusão Browniana adimensionalizada por uma escala de tempo convectiva. Dessa forma o termo de forças Brownianas domina de forma ainda mais clara os outros termos da equação conforme $Pe \rightarrow 0$.

Esta adimensionalização é interessante para a simulação de suspensões Brownianas com valores pequenos do número de Péclet, porém finitos, o que é fisicamente mais consistente do que a consideração de $Pe \rightarrow 0$. Além disso é possível verificar a influência da sedimentação no processo evolutivo e fazer ainda a análise para partículas sem inércia, com $St \rightarrow 0$ por exemplo.

Uma outra possibilidade de adimensionalização da equação governante dimensional, seria a substituição da escala de tempo convectiva a/U_s por uma escala de tempo de difusão Browniana a^2/\mathcal{D} . Utilizando essa escala alternativa, a equação adimensional é

dada por

$$\begin{aligned} \frac{St}{Pe} \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= -\mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{g}} + \frac{1}{Pe} \left(\frac{6}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{m_d^* \alpha}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe} \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon Eb^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r, \end{aligned}$$

multiplicando a equação acima por Pe e tomando o limite quando $Pe \rightarrow 0$ teríamos uma equação adimensional voltada à simulação de suspensões coloidais, dada por

$$\begin{aligned} St \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= \left(\frac{6}{\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon Eb^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r + \alpha \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{m_d^* \alpha}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}], \end{aligned}$$

como as forças de repulsão e contato na equação acima são artificiais e utilizadas numericamente a fim de se evitar overlap de partícula, elas não foram feitas tendendo a zero. Essa possibilidade de adimensionalização é interessante quando deseja-se por exemplo verificar o comportamento de propriedades de transporte da suspensão no limite em que $Pe \rightarrow 0$, entretanto é uma adimensionalização complicada por exemplo para avaliar o comportamento da suspensão quando $St \rightarrow 0$, já que não teríamos uma equação diferencial ou algébrica para a determinação da velocidade da partícula nesta condição.

Uma outra possibilidade ainda seria adimensionalizar a equação dimensional governante utilizando como escala de tempo o tempo de relaxação da partícula, dado por $m/(6\pi\eta a)$. Essa adimensionalização gera uma terceira possibilidade dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} &= -\mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{g}} + \left(\frac{6}{StPe\delta\tau} \right)^{1/2} \boldsymbol{\xi} \\ &+ \sum_{i \neq j} \frac{m_d^* \alpha}{Pe} \frac{1}{r_{ij}^4} [(\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j) \hat{r}_{ij} + (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_j + (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \mathbf{d}_i - 5 (\mathbf{d}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\mathbf{d}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij}] \\ &+ \frac{\alpha}{Pe} \mathbf{d}_i \cdot \nabla \mathbf{h} + \sum_{i \neq j, (2 < \epsilon_{ij} < 2.2)} \Lambda |\mathbf{u}_i| e^{(-\frac{\epsilon_{ij}}{\mathcal{Y}})} \hat{\mathbf{e}}_r + \sum_{i \neq j, (\epsilon_{ij} < 2)} \Upsilon Eb^{1/2} \epsilon_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{e}}_r. \end{aligned}$$

Cada uma das três adimensionalizações possui vantagens e desvantagens. Todas estão corretas e deve-se avaliar a conveniência do uso de cada uma de acordo com o objetivo, ou seja, de acordo com o que pretende-se obter através da simulação computacional da microestrutura da suspensão. A verificação de cadeias formadas devido à interações magnéticas na ausência de movimento Browniano por exemplo, pode ser observada

através da primeira adimensionalização adotada desligando-se a força Browniana numericamente e utilizando os parâmetros ψ_m e φ_m , como foi mostrado nesta Tese. Por outro lado para a obtenção da magnetização de equilíbrio da suspensão podemos utilizar esta mesma adimensionalização e deixar a força Browniana permanentemente ligada e utilizando a combinação de parâmetros α , m_d^* e Pe no lugar de ψ_m e φ_m . Se desejássemos investigar o comportamento desta mesma propriedade para $Pe \rightarrow 0$ poderíamos utilizar a segunda adimensionalização. Enfim, a escolha das escalas utilizadas para adimensionalizar a equação governante depende da conveniência e do que se deseja obter.