

**Abordagem 3D de acompanhamento  
de interface para a simulação  
numérica de escoamentos bifásicos  
com ferrofluido e surfactante insolúvel**

Wellington Carlos de Jesus

TESE APRESENTADA  
AO  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA  
DA  
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
PARA  
OBTENÇÃO DO TÍTULO  
DE  
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Programa: Matemática Aplicada  
Orientador: Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro da CAPES e do  
CNPq

São Paulo, agosto de 2014



**Abordagem 3D de acompanhamento  
de interface para a simulação  
numérica de escoamentos bifásicos  
com ferrofluido e surfactante insolúvel**

Esta versão da tese contém as correções e alterações sugeridas pela Comissão Julgadora durante a defesa da versão original do trabalho, realizada em 22/08/2014. Uma cópia da versão original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

**Comissão Julgadora:**

- Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma (orientador) - IME-USP
- Prof. Dr. Hector Daniel Cenicerros - UCSB
- Prof. Dr. Francisco Ricardo Cunha - UNB
- Prof. Dr. Luis Gustavo Nonato - ICMC-USP
- Prof. Dr. Daniel Reinaldo Cornejo - IF-USP



Faint, illegible text or markings in the top right corner.

A vertical column of extremely faint, illegible text or markings running down the left side of the page.





# Agradecimentos

Agradeço ao meu dedicado orientador Alexandre Megiorin Roma, pela dedicação, confiança, por todas nossas discussões sobre o trabalho e pelo seu esforço diário na manutenção e melhoria do Laboratório da Matemática Aplicada. Aos administradores do LabMap Eduardo Oda, Chico Sokol e Marcello Souza por todo o suporte ao laboratório. Ao professor Hector Daniel Ceniceros por me apresentar o mais belo dos problemas desse trabalho e por me receber junto com sua esposa Rosana na *University of California Santa Barbara*. Agradeço aos doutores Rudimar Luiz Nós, Millena Martins Villar e Márcio Ricardo Pivello cujos trabalhos foram a base do presente trabalho. Agradeço a todo corpo docente do IME pelos ensinamentos e o apoio em especial à professora Sônia pelas valiosas indicações e sugestões para meu início na pós no IME. Ao IME e a todos os seus funcionários pelos recursos e suporte oferecidos. Meu agradecimento aos revisores do *Journal of Computational Physics* e aos membros da banca por todas as sugestões e correções que enriqueceram o trabalho.

Agradeço à minha maravilhosa família por todo apoio, amor e incentivo nos momentos difíceis, meu pai Augusto e minha mãe Lucia, exemplos de caridade e bondade, aos meus irmãos Wilson, Ricardo, Claudete e Caroline, que são fontes inspiradoras de respeito ao próximo e determinação, meus sobrinhos Bruno, Gustavo e Sofia, que compreenderam minha ausência em suas comemorações. Minha gratidão especial para Carla Reis Evangelista, por todas as sugestões, discussões de ideias, modelos de camisa do LabMap, toda atenção, companheirismo em todos os momentos extressantes de laboratório, por ter dedicado valiosos anos de sua vida a mim, por compreender minha ausência, pelo seu carinho, inestimável incentivo e por sempre acreditar em mim e no meu potencial nos anos em que o presente trabalho foi desenvolvido.

Sou grato aos colegas e amigos do LabMap e do IME pela ajuda e companheirismo nesse período, Anderson, Daniel, Diane, Giselle, Juan, Larissa, Marcelo Caetano, Marcello Souza, Nelson, Nils, Oda, Tiago. Em especial ao Pedro, Priscila e Catalina.

Gostaria de agradecer as pessoas maravilhosas que encontrei na minha longa jornada que passou voando na Universidade de São Paulo e que me fizeram crescer e me desenvolver, na impossibilidade de citar todas registro aqui o nome de algumas: Ângelo Ítalo Mainine Neto, Júlio César (*in memoriam*), Patrícia Amorim, Elaine Silva, Eduardo Brito (cansado), Laureano Michel, João Basso Marques e aos meus fieis companheiros mogianos que também estiveram comigo em parte dessa minha aventura na usp, Renato Ribeiro e Sérgio Paes.

Não poderia deixar de agradecer ao COSEAS e todos os seus funcionários por toda a assistência prestada com moradia, alimentação a baixo custo e toda assistência estudantil oferecida. À CAPES e ao CNPq pelo suporte financeiro durante a realização deste trabalho.

“Há quem fale  
Que a vida da gente  
É um nada no mundo  
É uma gota é um tempo  
Que nem dá um segundo...  
Há quem fale  
Que é um divino  
Mistério profundo  
É o sopro do criador  
Numa atitude repleta de amor...  
Você diz que é luta e prazer  
Ele diz que a vida e viver  
Ela diz que melhor é morrer  
Pois amada não é  
E o verbo é sofrer...  
Eu só sei que confio na moça  
E na moça eu ponho a força da fé  
Somos nós que fazemos a vida  
Como der ou puder ou quiser...  
Sempre desejada  
Por mais que esteja errada  
Ninguém quer a morte  
Só saúde e sorte...  
E a pergunta roda  
E a cabeça agita  
Fico com a pureza  
Da resposta das crianças  
É a vida, é bonita  
E é bonita...  
Viver!  
E não ter a vergonha  
De ser feliz  
Cantar e cantar e cantar  
A beleza de ser  
Um eterno aprendiz...”

Luiz Gonzaga do Nascimento Júnior [1945-1991], em “Eterno Aprendiz”

# Resumo

Jesus, W. C. **Abordagem 3D de acompanhamento de interface para a simulação numérica de escoamentos bifásicos com ferrofluido e surfactante insolúvel**. 2014. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

A compreensão da dinâmica interfacial de escoamentos bifásicos dominados por forças de tensão superficial e ou controlados por um campo magnético permite prever as propriedades do escoamento em muitas aplicações práticas importantes tais como a entrega de fármaco num organismo vivo. Surfactantes e ferrofluidos tem um papel importante no controle desses escoamentos alterando a tensão superficial e permitindo o direcionamento por um campo magnético, respectivamente. Simulações numéricas de escoamentos bifásicos contendo esses elementos são uma abordagem eficaz para um melhor entendimento e são um suplemento valioso para testes, experimentos físicos e no desenvolvimento de novas aplicações. A dinâmica desses escoamentos transientes incompressíveis bifásicos com fases imiscíveis é modelada pelas equações de Navier-Stokes. Nesses escoamentos assume-se a existência de uma interface de separação sujeita a uma força de tensão superficial que sofre influência da concentração de um elemento surfactante insolúvel, distribuído por uma equação de advecção-difusão sobre a interface. Além disso, se uma das fases é um ferrofluido e a outra um fluido newtoniano, isotérmico, não magnetizável e não condutor existe uma densidade de força magnética calculada considerando-se as equações de Maxwell para um fluido não condutor. As principais forças externas atuantes são a de tensão superficial (de contato) e a magnética (de corpo). O domínio euleriano, um paralelepípedo, é discretizado com uma malha bloco-estruturada composta por refinamentos localizados empregando uma técnica de refinamento adaptativo de malha AMR (*Adaptive Mesh Refinement*) com operadores diferenciais específicos para essa malha. O domínio lagrangiano, a interface de separação, é representado por uma malha não estruturada com triângulos geodésicos onde um esquema de volumes finitos é empregado para resolver a equação da concentração de surfactante. Uma interpolação e uma otimização para uma malha que se deforma no tempo são desenvolvidas para representar esse domínio e utilizar o esquema de volumes finitos. A metodologia numérica para a solução do escoamento incompressível bifásico é baseada num método de projeção que desacopla a velocidade da pressão. No tempo, as equações são discretizadas por um esquema semi-implícito baseado numa metodologia implícita-explicita (IMEX). Os domínios eulerianos e lagrangiano são acoplados de maneira discreta pela definição de uma função distribuição (função delta de Dirac discreta) que permite a construção dos operadores espalhamento e interpolação discretos, intrínsecos do método da fronteira imersa utilizado. O movimento da interface de separação entre as fases é realizado por um método de dois estágios com passo variável. A força interfacial é aproximada para cada elemento triangular da malha lagrangiana e na presença de uma fase com ferrofluido a força magnética é calculada nos elementos de malha composta euleriana com

diferenças finitas. A metodologia empregada é verificada numericamente por meio de uma análise de convergência numérica usando a estratégia de “soluções manufaturadas”, avaliada quanto ao custo computacional e validada pela comparação com resultados de experimentos em laboratório e outros resultados teóricos ou numéricos da literatura. A dinâmica de surfactante apresenta excelentes propriedades de conservação de massa de surfactante em todos os casos considerados (com precisão de máquina sob certas circunstâncias). A metodologia numérica é aplicada ao estudo de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante na presença de um campo magnético externo. Esse estudo se concentra nos efeitos da magnitude de campo magnético e de surfactante sobre a geometria e orientação da gotícula. Tais estudos e a conservação de massa de surfactante em uma metodologia totalmente tridimensional são inéditos na literatura e pretendem contribuir para ampliar e desenvolver os estudos de manipulação de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético externo.

**Palavras-chave:** surfactante, ferrofluido, volumes finitos, otimização de malha.

# Abstract

Jesus, W. C. **A 3D front-tracking approach for simulation of a two-phase fluid with ferrofluid and an insoluble surfactant.** 2014. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

Understanding the interfacial dynamics of two-phase flows dominated by surface tension forces and or controlled by a magnetic field allows to predict the flow properties in many important practical applications such as drug delivery in a living organism. Surfactants and ferrofluids play an important role in controlling these flows by modifying the surface tension and allowing them to be directed by a magnetic field, respectively. Numerical simulations of two-phase flows containing these elements are an effective approach to better understanding and are a valuable supplement to tests, physical experiments and the development of new applications. The dynamics of incompressible transient two-phase flows with immiscible phases is modeled by Navier-Stokes equations. In these flows we assume the existence of an interface between phases subjected to a force of surface tension that is influenced by the concentration of an insoluble surfactant distributed by an advection-diffusion equation on the interface. Furthermore, if one of these phases is a ferrofluid and the other is a Newtonian, isothermal, non-conductive and non-magnetizable fluid, a magnetic force density calculated based on Maxwell's equations for a non-conductive fluid. The main external forces acting are the surface tension (contact) and magnetic (body). The Eulerian domain, a parallelepiped, is discretized with a composed block-structured grid with refinement capabilities employing a technique of adaptive mesh refinement AMR ( Adaptive Mesh Refinement) with specific differential operators to this grid. The Lagrangian domain, the interface between phases, is represented by an unstructured mesh composed by geodesic triangles where a finite volume scheme is employed to solve the surfactant concentration equation. We developed an interpolation and an optimization for an evolving mesh in time to represent this interface and apply to the finite volume scheme. The numerical approach to solve these two-phase incompressible flows is based on a projection method which decouples the velocity and pressure. In time, the equations are discretized by a semi-implicit scheme based on an implicit-explicit (IMEX) methodology. The Eulerian and Lagrangian domains are coupled in a discrete manner by defining a distribution function (discrete Dirac delta function) which allows us the construction of discrete scattering and interpolation operators intrinsic to the immersed boundary method. The evolution of the interface between the phases is performed by a two-stage method with a variable time step. The interfacial force is approximated to each triangular element of the Lagrangian mesh and in the presence of a phase with ferrofluid the magnetic force is calculated in Eulerian mesh elements by finite differences. The numerical methodology is verified numerically by numerical convergence analysis using the strategy of " manufactured solutions", evaluated on the computational cost and validated by comparison with results from laboratory experiments and

other theoretical and numerical results in the literature. The surfactant scheme provides excellent properties of conservation of mass of surfactant in all the cases considered (even to machine precision under certain circumstances). The numerical method is applied to study a ferrofluid droplet flow shear in the presence of an external magnetic field. This study focuses on the effects of the magnitude of the magnetic field and surfactant on the geometry and orientation of the droplet. Such studies and the conservation of mass of surfactant in a fully 3D methodology are unprecedented in the literature and are intended to help expand and develop the study of manipulating droplets of ferrofluid in the presence of an external magnetic field.

**Keywords:** surfactant, ferrofluid, finite volume, mesh optimization.

# Sumário

<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos . . . . .	4
1.2 Surfactantes . . . . .	6
1.3 Ferrofluidos . . . . .	8
1.4 Ferrofluidos com surfactantes . . . . .	11
1.5 Organização . . . . .	11
<b>2 Modelagem matemática</b>	<b>13</b>
2.1 escoamento incompressível de um fluido bifásico . . . . .	13
2.2 Forças externas atuantes . . . . .	15
2.2.1 Força de tensão superficial . . . . .	16
2.2.2 Força magnética . . . . .	17
2.3 Modelo matemático completo: uma síntese . . . . .	19
2.3.1 escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel . . . . .	19
2.3.2 escoamento bifásico não condutor submetido a uma força magnética . . . . .	20
2.3.3 Modelo matemático completo: um diagrama esquemático . . . . .	21
<b>3 Metodologia numérica</b>	<b>23</b>
3.1 Domínio euleriano: malha uniforme . . . . .	23
3.2 Domínio euleriano: malha composta . . . . .	25
3.2.1 Descrição de uma malha composta bloco-estrutura . . . . .	26
3.2.2 Células fantasmas . . . . .	28
3.2.3 Discretização dos operadores diferenciais na malha composta . . . . .	29
3.3 Domínio lagrangiano . . . . .	30
3.3.1 Operador de levantamento sobre a interface . . . . .	31
3.3.2 Otimização de malha . . . . .	32
3.3.3 Correção de volume da interface inersa . . . . .	34
3.4 Função indicadora de fluido . . . . .	35

3.5	Escoamento bifásico incompressível transiente . . . . .	36
3.5.1	Método da projeção de Chorin-Teman . . . . .	37
3.5.2	Discretização no tempo: métodos implícitos-explícitos . . . . .	37
3.5.3	Discretização no tempo para o modelo de escoamento bifásico . . . . .	39
3.5.4	Acoplamento discreto entre os domínios lagrangiano e euleriano . . . . .	40
3.5.5	Discretização para a equação de movimento da interface . . . . .	41
3.6	Discretização das forças externas atuantes no escoamento . . . . .	41
3.6.1	Discretização da equação de concentração de surfactante . . . . .	41
3.6.2	Discretização da força interfacial . . . . .	43
3.6.3	Discretização da força magnética . . . . .	44
3.7	Sumário da metodologia numérica . . . . .	47
3.7.1	Algoritmo para o modelo de um escoamento bifásico não condutor submetido à uma força magnética . . . . .	49
3.7.2	Algoritmo para o modelo de um escoamento bifásico na presença de um sur- factante insolúvel . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Resultados: verificações</b>	<b>51</b>
4.1	Normas, análise de convergência numérica e domínio discreto . . . . .	51
4.2	Equação de Navier Stokes . . . . .	53
4.3	Força magnética . . . . .	55
4.4	Equação da dinâmica de surfactante insolúvel . . . . .	58
4.4.1	Verificação numérica da ordem do método de volumes finitos aplicado . . . . .	58
4.4.2	Conservação numérica de massa de surfactante . . . . .	60
4.5	Avaliação da otimização de malha lagrangiana . . . . .	60
4.6	Custo computacional . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Resultados: validações</b>	<b>65</b>
5.1	Gotícula newtoniana num escoamento cisalhante . . . . .	65
5.2	Gotícula de ferrofluido num campo magnético uniforme . . . . .	68
<b>6</b>	<b>Resultados: aplicações</b>	<b>75</b>
6.1	Gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante . . . . .	75
6.2	Tamanho do domínio . . . . .	76
6.3	Resolução dos domínios euleriano e lagrangiano . . . . .	82
6.4	Gotícula de ferrofluido na presença de um surfactante insolúvel . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>99</b>
7.1	Contribuições . . . . .	100
7.2	Perspectivas para pesquisas futuras . . . . .	100
<b>A</b>	<b>Desenvolvimento da equação de transporte de surfactante insolúvel generalizado para uma curva ou superfície deformável</b>	<b>101</b>
A.1	Variiedades Riemannianas . . . . .	101
A.2	Equação de transporte de Surfactante . . . . .	103
A.3	Adimensionalização da equação de transporte de surfactante . . . . .	106



A.4	Operador Divergente sobre uma curva ou superfície . . . . .	107
<b>B</b>	<b>Dedução da força interfacial</b>	<b>108</b>
<b>C</b>	<b>Força de corpo magnética</b>	<b>110</b>
C.1	Definição de campo magnético e apresentação de unidades . . . . .	110
C.2	Força magnética dipolar . . . . .	111
C.3	Equações de <i>Maxwell</i> . . . . .	112
C.4	Conceitos preliminares para a dedução da força magnética . . . . .	114
<b>D</b>	<b>Adimensionalização das equações de um escoamento com um componente mag- nético</b>	<b>116</b>
D.1	Primeira forma adimensional . . . . .	117
D.2	Segunda forma adimensional . . . . .	117
<b>E</b>	<b>Adams-Bashforth de dois passos com espaçamento variável</b>	<b>118</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>120</b>
	<b>Índice Remissivo</b>	<b>134</b>

## Lista de Abreviaturas

AMR	Refinamento Adaptativo de Malhas ( <i>Adaptive Mesh Refinement</i> )
IMEX	Métodos Implícitos-Explícitos ( <i>Implicit-Explicit methods</i> )
GTS	Biblioteca de triangulação de superfícies ( <i>GNU Triangulated Surface Library</i> )
UCSB	Universidade da Califórnia, Santa Barbara ( <i>University of California, Santa Barbara</i> )

# Lista de Símbolos

<b>u</b>	Velocidade	metros por segundo	$m \cdot s^{-1}$	-	-
<b><math>\eta</math></b>	Viscosidade dinâmica	Pascal-segundo	$Pa \cdot s$	-	-
<b>p</b>	Pressão	Pascal	$Pa$	-	-
<b><math>\rho</math></b>	Densidade	quilograma por metro cúbico	$kg \cdot m^{-3}$	-	-
<b><math>\rho_c</math></b>	Densidade da fase contínua	quilograma por metro cúbico	$kg \cdot m^{-3}$	-	-
<b><math>\rho_d</math></b>	Densidade da fase dispersa	quilograma por metro cúbico	$kg \cdot m^{-3}$	-	-
<b><math>\sigma_0</math></b>	Tensão superficial de uma interface limpa	Joule por metro quadrado	$J \cdot m^{-2}$	Newton por metro	$N \cdot m^{-1}$
<b><math>\sigma</math></b>	Tensão superficial	Joule por metro quadrado	$J \cdot m^{-2}$	Newton por metro	$N \cdot m^{-1}$
<b><math>\Gamma_0</math></b>	Concentração inicial de surfactante	fração de massa	%wt	-	-
<b><math>\Gamma</math></b>	Concentração de surfactante	adimensional	-	-	-
<b>D</b>	Deslocamento elétrico	Coulomb por metro quadrado	$C \cdot m^{-2}$	-	-
<b>E</b>	Intensidade de campo elétrico	Newton por Coulomb	$N \cdot C^{-1}$	Volt por metro	$V \cdot m^{-1}$
<b><math>\epsilon_0</math></b>	Permissividade elétrica do vácuo	-	$C^2 \cdot N^{-1} \cdot m^{-2}$	Farad por metro	$F \cdot m^{-1}$
<b>B</b>	Indução magnética	Tesla	$T$	-	-
<b><math>H_0</math></b>	Intensidade de campo magnético aplicado	Ampère por metro	$A \cdot m^{-1}$	-	-
<b>H</b>	Intensidade de campo magnético	Ampère por metro	$A \cdot m^{-1}$	-	-
<b>M</b>	Magnetização	Ampère por metro	$A \cdot m^{-1}$	-	-
<b>J</b>	Densidade de corrente	Ampère por metro quadrado	$A \cdot m^{-2}$	-	-
<b><math>\rho_e</math></b>	Densidade volumétrica de carga elétrica	Coulomb por metro cúbico	$C \cdot m^{-3}$	-	-
<b><math>\mu_0</math></b>	Permeabilidade magnética do vácuo	Newton por Ampère quadrado	$N \cdot A^{-2}$	-	-
<b><math>\mu</math></b>	Permeabilidade magnética	Newton por Ampère quadrado	$N \cdot A^{-2}$	-	-
<b><math>\mu_c</math></b>	Permeabilidade magnética, fase contínua	Newton por Ampère quadrado	$N \cdot A^{-2}$	-	-
<b><math>\mu_d</math></b>	Permeabilidade magnética, fase dispersa	Newton por Ampère quadrado	$N \cdot A^{-2}$	-	-
<b><math>\chi</math></b>	Susceptibilidade magnética	adimensional	-	-	-
<b><math>\sigma_e</math></b>	Condutividade elétrica	recíproca de Ohm-metro	$(\Omega \cdot m)^{-1}$	Siemens por metro	$S \cdot m^{-1}$
<b><math>\sigma_m</math></b>	Tensor magnético	-	-	-	-
<b><math>\beta</math></b>	Parâmetro físico-químico	adimensional	-	-	-
<b>C</b>	Relação advecção-difusão de surfactante	adimensional	-	-	-

# Lista de Figuras

- 1.1 **Estratégia terapêutica usando partículas magnéticas.** Nanopartículas magnéticas são injetadas no corpo por um sistema de entrega de fármaco, “drug-delivery system (DDS)”. As nanopartículas magnéticas podem ser usadas como ferramenta para o diagnóstico de câncer realizado com uma imagem da ressonância magnética, “magnetic resonance imaging (MRI)” usando um aparelho de “magneto impedância (MI)”. A hipertermia (hyperthermia), superaquecimento da região do tumor que facilita a morte das células cancerígenas, pode ser induzida pela alteração do campo magnético nas nanopartículas como medida terapêutica. Dessa maneira nanopartículas magnéticas podem ser usadas no diagnóstico e como medida terapêutica para o câncer. Adaptado de [Barakat \(2009\)](#), com licença de reuso. . . . . 2
- 1.2 Nanopartículas magnéticas com medicamento foram injetadas nas articulações e mantidas por magnetos permanentes extracorporais fixados por curativos. Adaptado de [Hoffman-Antenbrink et al. \(2009\)](#). . . . . 3
- 1.3 **Implante de uma válvula com ferrofluido no olho de um coelho confeccionada para o tratamento de glaucoma.** Seta preta indica o túnel subconjuntival sobre o tubo da válvula. (A conjuntiva é uma membrana mucosa presente nos olhos dos vertebrados que reveste a parte interna da pálpebra e a superfície exposta da córnea, revestindo igualmente a parte posterior da pálpebra que prolonga-se para trás para recobrir a esclera, veja Figura 1.4). **A)** O invólucro permanece no exterior na parte inferior do fundo do fórnix. **B)** Escoamento do humor aquoso é mostrado no coelho vivo. Adaptado de [Paschalis et al. \(2013\)](#), com licença de reuso. 3
- 1.4 Corte sagital do olho humano mostrando a retina (*retina*); o coróide (*choroid*), o humor vítreo (*vitreous humor*), a esclera (*sclera*). Adaptado de [Sherwood \(2010\)](#). . . 4
- 1.5 Acima a degeneração no humor vítreo (“vitreous gel”), abaixo o local da adesão (“adhesion site”) entre a retina e o humor vítreo e subsequentemente o dilacerar da retina (“retina tear”) seguido do deslocamento de retina (“retina detachment”). Adaptado de [Dailey et al. \(1999\)](#), com licença de reuso. . . . . 5
- 1.6 **Procedimento cirúrgico para o tratamento de deslocamento de retina com ferrofluido:** (1) Um magneto permanente (a) com um campo magnético pré-alinhados é colocado na extremidade próxima ao deslocamento de retina (b), (2) uma gotícula de ferrofluido (c) é injetada no humor vítreo, (3) atraída pelo magneto a gotícula de ferrofluido fecha o orifício na retina e (4) o corpo absorve o líquido acumulado abaixo da retina. Adaptado de [Mefford et al. \(2007\)](#), com licença de reuso. 6

2.1	Gotícula imersa de ferrofluido sob a ação de um magneto. . . . .	17
2.2	Gotícula imersa num fluido sujeito à tensão superficial. . . . .	19
2.3	Modelo matemático de um escoamento incompressível e transiente de um fluido bifásico (fases imiscíveis). Uma das fases pode conter um componente ferromagnético. . . . .	22
3.1	Local da célula computacional onde variáveis discretas são calculadas: variáveis escalares como pressão, a densidade de massa, a viscosidade, a suscetibilidade e a permeabilidade magnética são calculadas no centro da célula computacional ( <b>A</b> ); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção <b>x</b> são calculadas no centro da face <b>yz</b> ( <b>B</b> ); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção <b>y</b> são calculadas no centro da face <b>xz</b> ( <b>C</b> ); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção <b>z</b> são calculadas no centro da face <b>xy</b> ( <b>D</b> ). . . . .	24
3.2	Corte de uma malha euleriana bloco estruturada com malha lagrangiana triangular não estruturada imersa no domínio euleriano. . . . .	26
3.3	Malhas não propriamente aninhadas: (a) canto incompatível, primeira restrição violada e (b) fronteira do bloco incompatível, segunda restrição violada. . . . .	27
3.4	Malha propriamente aninhada. . . . .	28
3.5	(a) Tipos de aproximações para as células fantasmas do bloco $G_{2,2}$ : condição de contorno do domínio ( <i>A</i> ), malhas irmãs (retalhos no mesmo nível) ( <i>B</i> ) e interpolação fina-grossa de ordem 2 ( <i>C</i> ). (b) Estêncil da interpolação fina-grossa na célula $(i + 1, j)$ . . . . .	28
3.6	Interface triangularizada. . . . .	30
3.7	Pontos na vizinhança de $P_k$ utilizados na construção da função de interpolação: (a) possíveis configurações de estêncil quando $P_k$ é um vértice, neste caso o número de pontos é igual a $N = 19$ ou $16$ (incluindo $P_k$ ) e (b) quando $P_k$ está no interior de um triângulo o número de pontos é $N = 12$ ou $11$ . . . . .	31
3.8	O triângulo “levantado” sobre a interface (o triângulo curvo), $\hat{S}_k = \hat{P}(S_k)$ , e a projeção sobre a interface de $X_{S_k} \in S_k$ , $X_{\hat{S}_k} = \hat{P}(X_{S_k})$ . . . . .	32
3.9	O primeiro anel do vértice $v_k$ . . . . .	33
3.10	Superfície discretizada original (esquerda) e com otimização de malha (direita). . . . .	33
3.11	Dado um ponto $P$ ( $P'$ ) pertencente a malha euleriana, o ponto $Q$ ( $Q'$ ) $\in S$ que minimiza a distância euclidiana entre $P$ ( $P'$ ) e $S$ pode estar localizado numa face, em uma aresta ou em um vértice. (a) Prisma reto de base triangular no qual $P$ está contido, enquanto $Q$ está localizado na face. (b) Canaletas sobre a superfície triangularizada na qual $P'$ , $P$ estão contidos nas canaletas e $Q'$ , $Q$ estão localizados na aresta e no vértice respectivamente. . . . .	36
3.12	(a) Dois triângulos adjacentes $S_k$ e $S_{k_i}$ , e sua aresta comum $e_i$ . (b) A célula de volumes finitos $\hat{S}_k = \hat{P}(S_k)$ (o triângulo curvo) e a projeção sobre a interface de $X_{S_k}$ , $X_{\hat{S}_k} = \hat{P}(X_{S_k})$ . . . . .	42

3.13 Local da célula computacional onde variáveis discretas são calculadas: as variáveis potencial escalar magnético,  $\psi_{ijk}$ , as componentes  $h_{xijk}$ ,  $h_{yijk}$  e  $h_{zijk}$  do campo magnético, as componentes  $(\sigma_{m_{xx}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{yy}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{zz}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{xy}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{yz}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{zx}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{zz}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{yz}})_{ijk}$  e  $(\sigma_{m_{xy}})_{ijk}$  do tensor magnético são calculadas no centro da célula computacional ( $a_0$ ); a componente da força magnética na direção  $x$ ,  $f_{m_x} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{xijk}$ , é calculadas no centro da face  $yz$  ( $b_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{xx}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}$ ,  $(\sigma_{m_{xz}})_{(i-1/2)(j)(k+1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j+1/2)(k)}$ , respectivamente nos pontos  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$  e  $b_4$ ; a componente da força magnética na direção  $y$ ,  $f_{m_y} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{yijk}$ , é calculadas no centro da face  $xz$  ( $c_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{yx}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}$ ,  $(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k+1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{yx}})_{(i+1/2)(j-1/2)(k)}$ , respectivamente nos pontos  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  e  $c_4$ ; a componente da força magnética na direção  $z$ ,  $f_{m_z} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{zijk}$ , é calculadas no centro da face  $xy$  ( $b_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{zx}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j+1/2)(k-1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{zx}})_{(i+1/2)(j)(k-1/2)}$  respectivamente nos pontos  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $d_3$  e  $d_4$ . . . . . 48

4.1 Malhas utilizadas na verificação numérica por meio de solução manufaturada: (a) malha composta pela união de blocos e (b) malha composta, bloco-estruturada com um nível de refinamento, representando as letras  $W$ ,  $A$  e  $H$ . . . . . 53

4.2 Exemplo de subdivisões de uma região da malha lagrangiana em triângulos, utilizadas na verificação numérica por meio de solução manufaturada. . . . . 53

4.3 Coordenadas esféricas  $(a, \phi, \theta)$ : a distância radial  $a$ , o ângulo azimutal  $\phi$  e o ângulo radial  $\theta$ . . . . . 59

4.4 Evolução da concentração de surfactante sobre uma esfera pulsante para os instantes  $t = 0.0$ ,  $t = 0.25$ ,  $t = 0.50$ ,  $t = 0.75$  e  $t = 1.0$ . . . . . 59

4.5 (a) Gráfico de  $\mathcal{M}^t - \mathcal{M}^0$  em função do tempo,  $t$ , na qual  $\mathcal{M}^t$  é a massa total de surfactant no tempo  $t$ . (b) Concentração de surfactante em  $t = T/2$  s. . . . . 61

4.6 A interface para  $t = T/2$  de uma interface esférica num escoamento periódico reversível sem (esquerda) e com (direita) otimização. . . . . 62

4.7 Escoamento periódico reversível com otimização lagrangiana e correção de volume para  $t \in [0, 0.5]$ . Número de chamadas do algoritmo de otimização por passo no tempo em função: do tempo (acima na esquerda), da deformação (acima na direita), do número de triângulos obtusângulos (abaixo na esquerda). Erro no volume em função do tempo (abaixo na direita). . . . . 63

5.1 À esquerda, seção transversal paralela ao plano  $xy$  e à direita seção transversal paralela ao plano  $yz$  de uma gotícula num escoamento cisalhante simples:  $a$  é o raio da gota não deformada,  $L$  é o eixo maior,  $B$  é o eixo menor,  $\theta$  é o ângulo de inclinação e  $W$  é a dimensão da interface na direção  $z$ . . . . . 66

5.2 Comparação entre resultados experimentais e computacionais (presente trabalho e Feigl *et al.* (2007)) para os valores:  $\zeta = 1$ ,  $\beta = 0.0$  (interface limpa),  $\beta = 0.80$  (interface com surfactante) e razão de viscosidade de  $\lambda = 3.335$ . . . . . 67

- 5.3 Comparação entre resultados experimentais e computacionais (presente trabalho e Feigl *et al.* (2007)) para os valores:  $\zeta = 1$ ,  $\beta = 0.0$  (interface limpa),  $\beta = 0.80$  (interface com surfactante) e razão de viscosidade  $\lambda = 30$ . . . . . 68
- 5.4 Resultados de simulações em um escoamento cisalhante simples comparados com as estimativas numéricas de Li e Pozrikidis (1997) e Feigl *et al.* (2007) para  $\lambda = 1$ ,  $\zeta = 10$  e  $\beta = 0.1$ . . . . . 69
- 5.5 À esquerda, campo de velocidades em  $m \cdot s^{-1}$  na direção  $x$  em plano de corte paralelo ao plano  $xy$ . Ao centro, gotícula imersa no domínio computacional, destacando-se os cinco níveis de refinamento da malha composta. À direita, detalhe da interface mostrando a distribuição de surfactante no estado estacionário. Parâmetros empregados: razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , número de capilaridade  $Ca_0 = 0.127351$  com a presença de um surfactante insolúvel ( $\beta = 0.8$ ). Na direita temos uma seção transversal paralela ao plano  $xy$ , na qual está representado o campo de velocidades na direção  $x$ . No centro temos a mesma seção destacando os cinco níveis de refinamento utilizados nessa simulação, com uma pequena interface imersa ao centro. Na esquerda é apresentado uma ampliação da interface que mostra a distribuição de surfactante sobre a superfície no estado estacionário. Tais resultados são resultados de uma simulação de escoamento bifásico com razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , para um número de  $Ca_0 = 0.127351$  com a presença de um surfactante insolúvel ( $\beta = 0.8$ ). 69
- 5.6 Formato da gotícula, campo de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), velocidade na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e velocidade na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação realizada nesta seção: (a) do primeiro passo de integração, (b) do passo de integração de número 100 e (c) do estado estacionário. . . . . 72
- 5.7 Formato da gotícula, campo de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), velocidade na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e velocidade na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação realizada nesta seção: (a) do primeiro passo de integração, (b) do passo de integração de número 100 e (c) do estado estacionário. . . . . 73
- 5.8 Campo magnético ( $A \cdot m^{-1}$ ) do plano de corte paralelo ao plano  $xy$  passando pela origem estimado por uma simulação com  $Bo_m = 17.8$  e  $\chi = 0.8903$  para o interior de uma gotícula de ferrofluido no estado de equilíbrio. . . . . 74
- 6.1 Comparação entre os parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores:  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$ ;  $\lambda = 0.335$  e  $\chi = 0.8903$ . . . . . 77
- 6.2 Comparação entre os comprimentos da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$ ;  $\lambda = 0.335$  e  $\chi = 0.8903$  na direção: (a) do eixo maior  $L$  e (b) do eixo menor  $B$ . . . . . 78
- 6.3 Comparação entre os parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores:  $Bo_m = 0.0, 0.8977$ ;  $\lambda = 30$  e  $\chi = 0.8903$ . . . . . 79



- 6.4 Comparação entre razões de deformação de Taylor,  $D = (L - B)/(L + B)$ , das gotículas no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores: (a)  $\lambda = 0.335$ ,  $\chi = 0.8903$ ,  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$  e (b)  $\lambda = 30$ ,  $\chi = 0.8903$ ,  $Bo_m = 0.0, 0.8977$ . . . . . 80
- 6.5 Formato da gotícula (na esquerda), magnitude de vorticidade (no centro) e magnitude do campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da uma simulação com  $Bo_m = 0.897721$ , razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , número de capilaridade  $Ca_0 = 0.5$  e  $\chi = 0.8903$ : (a) do primeiro passo de integração e (b) do estado estacionário. . . . . 80
- 6.6 Seção transversal paralela ao plano  $xy$  dos domínios utilizados na avaliação de influência do tamanho do domínio. . . . . 81
- 6.7 Deformação dos parâmetros geométricos e orientação de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante submetidas a um campo magnético externo. . . . . 81
- 6.8 Deformação dos parâmetros geométricos de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante submetidas a um campo magnético externo para três resoluções de domínios euleriano e lagrangiano em função do tempo adimensional  $\bar{t}$  (dado pelo tempo atual multiplicado pela razão de cisalhamento  $\dot{\gamma}$ ). . . . . 83
- 6.9 Campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  no primeiro passo de integração para o caso: (a)  $C20a81920$ , (b)  $C20a20480$  e (c)  $C20a5120$ . . . . . 83
- 6.10 Comparação entre as deformações dos parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos caos  $A\#$ . . . . . 86
- 6.11 Comparação entre as deformações dos parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos caos  $B\#$ . . . . . 86
- 6.12 Comparação entre as deformações da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos casos  $A\#$  e  $B\#$ . . . . . 87
- 6.13 Formato da gotícula e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso  $A3$ : da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração e (d) no estado estacionário. . . . . 87
- 6.14 Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação do caso  $A4$ : (a) no primeiro passo de integração, (b) no estado estacionário. . . . . 88
- 6.15 Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso  $A4$ : (a) no primeiro passo de integração, (b) no estado estacionário. . . . . 89
- 6.16 Formato da gotícula, distribuição de surfactante e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso  $A5$ : da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração, e (d) no estado estacionário. . . . . 90



- 6.17 Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xz$  resultantes da simulação do caso A6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário. . . . . 91
- 6.18 Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso A6: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário. . . . . 92
- 6.19 Formato da gotícula e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso C3: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (d) no primeiro passo de integração, (e) no passo de integração 300 e (f) no estado estacionário. . . . . 93
- 6.20 Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação do caso C4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário. . . . . 94
- 6.21 Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso C4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário. . . . . 95
- 6.22 Formato da gotícula, distribuição de surfactante e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso C5: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração e (d) no passo de integração 300. . . . . 96
- 6.23 Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xz$  resultantes da simulação do caso C6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300. . . . . 97
- 6.24 Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso C6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300. . . . . 98
- B.1 A tensão superficial agindo ao longo de uma seção da interface  $S$ . . . . . 108

xviii LISTA DE FIGURAS

C.1 Barra magnética contendo uma abertura transversal estreita. . . . .	111
C.2 Pequeno elemento de volume magnetizado e polarizado. . . . .	112

# Lista de Tabelas

4.1	Erro e ordem de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com ciclo W no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis. . . . .	54
4.2	Erro e ordem de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta com dois níveis de refinamento, com ciclo W no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis. . . . .	55
4.3	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\sigma_m)_{xx}$ , $(\sigma_m)_{yy}$ e $(\sigma_m)_{zz}$ do tensor magnético $\sigma_m$ , em uma malha uniforme, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	57
4.4	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\sigma_m)_{xy}$ , $(\sigma_m)_{xz}$ e $(\sigma_m)_{yz}$ do tensor magnético $\sigma_m$ , em uma malha uniforme, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	57
4.5	Erro e a ordem de convergência da função potencial escalar magnético $\phi$ e da componente $(\nabla \cdot \sigma_m)_x$ do divergente do tensor magnético, em uma malha uniforme, com ciclo W no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódica nas direções $x$ , $y$ e Neumann na direção $z$ para a função potencial escalar magnético. . . . .	57
4.6	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\nabla \cdot \sigma_m)_y$ e $(\nabla \cdot \sigma_m)_z$ do divergente do tensor magnético, em uma malha uniforme, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	57
4.7	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\sigma_m)_{xx}$ , $(\sigma_m)_{yy}$ e $(\sigma_m)_{zz}$ do tensor magnético $\sigma_m$ , em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	57
4.8	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\sigma_m)_{xy}$ , $(\sigma_m)_{xz}$ e $(\sigma_m)_z$ do tensor magnético $\sigma_m$ , em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	58
4.9	Erro e a ordem de convergência da função potencial escalar magnético $\phi$ e da componente $(\nabla \cdot \sigma_m)_x$ do divergente do tensor magnético, em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo W no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódica nas direções $x$ , $y$ e Neumann na direção $z$ para a função potencial escalar magnético. . . . .	58
4.10	Erro e a ordem de convergência das componentes $(\nabla \cdot \sigma_m)_y$ e $(\nabla \cdot \sigma_m)_z$ do divergente do tensor magnético, em uma malha composta com dois níveis de refinamento, com ciclo W no <i>multigrid</i> . . . . .	58
4.11	Número de triângulos, tamanho médio e desvio padrão das arestas para $t = 0$ e $t = 1/2$ .	59
4.12	Erro e ordem de convergência do esquema de volumes finitos em duas normas diferentes, para $\Delta t = 1/32000 \ll h^2$ . Para malhas com 320, 1280 e 5120 triângulos. . . . .	59

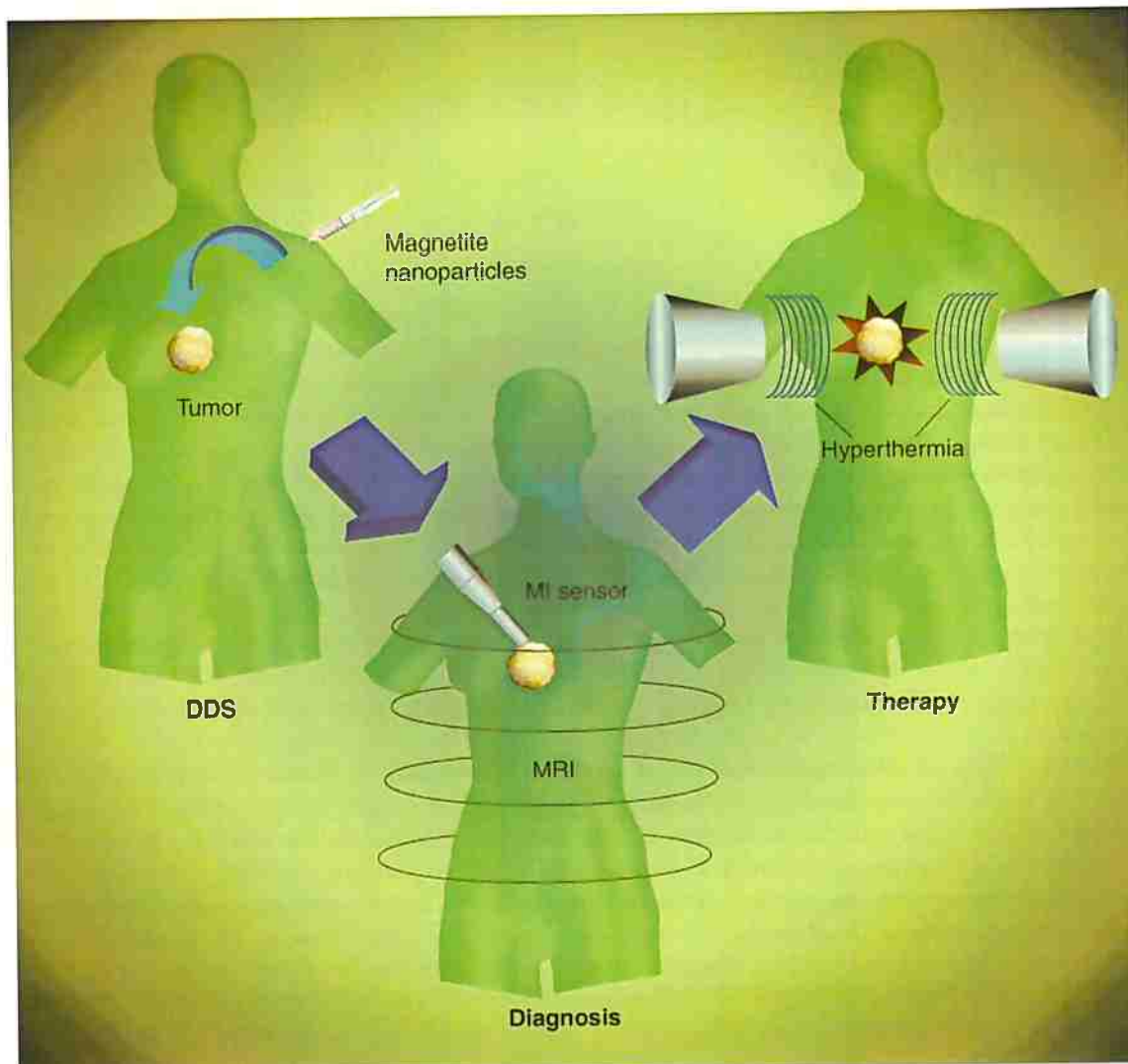
4.13	Erro e ordem de convergência do esquema de volumes finitos em duas normas diferentes, para $\Delta t = O(h)$ . . . . .	60
4.14	Ângulo ( $\angle$ ), qualidade ( $Q$ and $\iota$ ) e desvio padrão correspondente (std) para $t = T/2$ : com otimização (coluna B), com otimização e correção de volume (cluna C). Na última linha os tempo são relativos ao tempo despendido quando otimização e correção de malha não foram aplicadas (coluna A). . . . .	62
4.15	Células eulerianas empregadas, quantidade de memoria usada e tempo gasto em um passo no tempo em diversas malhas relativo ao tempo para a computação com uma malha composta com cinco níveis de refinamento. . . . .	64
6.1	Aresta $[-C; C]$ do domínio cúbico e $mnr$ , o número de níveis de refinamento AMR, utilizados na avaliação de influência do tamanho do domínio no qual $a = 1.2910 \times 10^{-3}$ $m$ é o raio da gotícula não deformada. . . . .	76
6.2	Parâmetros das simulações utilizadas na avaliação de influência do tamanho do domínio. 78	78
6.3	Deformação e orientação da gotícula para o estado estacionário obtidos para a avaliação de influência do tamanho do domínio. . . . .	78
6.4	Alguns resultados das simulações da avaliação de influência do tamanho do domínio, entre eles o NCE: número de células eulerianas, NPEE: número de passos para o estado estacionário e TPPI: média do tempo em segundos dos 1000 primeiros passos de integração. . . . .	79
6.5	Caso considerado, número de vértices, triângulos e arestas. Nas colunas seguintes o comprimento de aresta máximo, mínimo e médio para cada malha. . . . .	82
6.6	Caso considerado, razão da resolução das malhas euleriana e lagrangiana ( $h/h_{lmed}$ ), resolução do nível mais fino do domínio euleriano ( $h$ ), o NCEIG: número de células eulerianas do interior da gotícula e a razão do raio inicial da gotícula pela resolução do nível mais fino euleriano ( $a/h$ ). . . . .	82
6.7	Parâmetros de simulação utilizados nos casos $A\#$ e $B\#$ . . . . .	84
6.8	Alguns adimensionais utilizados nos casos $A\#$ . . . . .	85
6.9	Alguns adimensionais utilizados nos casos $B\#$ . . . . .	85
6.10	Parâmetros de simulação utilizados nos casos $C\#$ . . . . .	90
D.1	Escalas para a adimensionalização. . . . .	116
D.2	Quantidades características utilizadas. . . . .	116

# Capítulo 1

## Introdução

A compreensão da dinâmica interfacial de sistemas bifásicos controlados por um campo magnético e ou dominados por forças de tensão superficial permite prever as propriedades do escoamento em muitas aplicações práticas importantes tais como a entrega e manipulação de fármacos no corpo de um organismo vivo. A entrega de fármacos é um importante componente do tratamento de doenças tanto do ponto de vista comercial como científico, assim como o método utilizado tem um efeito significativo na eficácia. Nos últimos anos, muitas pesquisas têm-se dedicado à criação de novos sistemas de entrega de drogas com o objetivo de direcionar o fármaco para um local específico, de tal modo que o fármaco é liberado a uma taxa controlada e no momento desejado exato (Barakat, 2009). A entrega de fármacos de maneira localizada (*drug targeting*) surgiu como uma das tecnologias modernas para a entrega de medicamentos (Torchilin, 2000). A entrega localizada em regiões específicas do corpo simplifica o procedimento de administração, reduz a quantidade necessária para atingir níveis terapêuticos, diminui a concentração de fármaco em locais que não sejam alvo (possivelmente reduzindo os efeitos colaterais) e, essencialmente, aumenta a concentração da droga em locais alvo (Eeckman *et al.*, 2002; Etrych *et al.*, 2001; Liu *et al.*, 2005; Sunderland *et al.*, 2006). Existem muitas abordagens diferentes para a entrega direcionada de fármacos (*targeted drug delivery*), as quais são classificadas em três categorias: abordagens químicas, que incorporam sistemas de distribuição e permite direcionar para regiões alvo específicas ou órgãos baseando-se na previsão da ativação enzimática, abordagens biológicas, que envolvem a entrega do fármaco através de um sistema transportador, por exemplo anticorpos, e abordagens físicas, que exigem que o fármaco seja confeccionado usando um dispositivo de entrega de partículas (por exemplo, um magneto). No último caso, a liberação do fármaco depende da localização física das partículas. Sistemas magnéticos de entrega direcionada e manipulação de fármacos são métodos promissores que permitem a entrega de fármaco em áreas alvo e permite fixá-lo nesta região com o auxílio de um campo magnético. Tipicamente, o fármaco e um componente magnético adequado (em geral nanopartículas magnéticas) são usados na elaboração de um elemento farmacológico estável (entre eles os chamados ferrofluidos biocompatíveis). Uma grande variedade de polímeros carregadores tem sido desenvolvida para controlar a liberação do fármaco (Brannon-Peppas e Blanchette, 2004). Nanopartículas magnéticas podem ser usadas numa grande variedade de aplicações biomédicas (Pankhurst *et al.*, 2003), desde como agentes de contraste para uma ressonância magnética até para a destruição de células de câncer por meio do tratamento de hipertermia (Figura 1.1).

Ainda para o tratamento do câncer, na quimioterapia é preciso balancear eficácia e toxicidade. Uma série de estratégias têm sido desenvolvidas visando resolver esse balanço com o uso da entrega de fármaco direcionada com partículas magnéticas. A primeira terapia clínica para o câncer usando partículas magnéticas aplicada em humanos para o tratamento de câncer em estágio avançado no fígado foi reportada em 1996 na Alemanha (Lübbe *et al.*, 1996). A maioria destas aplicações exigem interações bem definidas e controláveis entre os componentes envolvidos (Barakat, 2009) (muitas das vezes os componentes estão presentes num escoamento em que uma das fases é um componente magnético direcionado por um campo magnético). A Figura 1.2 ilustra uma ovelha sendo tratada de doenças localizadas nas articulações com um magneto extracorporal (fixado com curativos em



**Figura 1.1: Estratégia terapêutica usando partículas magnéticas.** Nanopartículas magnéticas são injetadas no corpo por um sistema de entrega de fármaco, “drug-delivery system (DDS)”. As nanopartículas magnéticas podem ser usadas como ferramenta para o diagnóstico de câncer realizado com uma imagem da ressonância magnética, “magnetic resonance imaging (MRI)” usando um aparelho de “magneto impedância (MI)”. A hipertermia (hyperthermia), superaquecimento da região do tumor que facilita a morte das células cancerígenas, pode ser induzida pela alteração do campo magnético nas nanopartículas como medida terapêutica. Dessa maneira nanopartículas magnéticas podem ser usadas no diagnóstico e como medida terapêutica para o câncer. Adaptado de Barakat (2009), com licença de reuso.

azul) responsável por fixar o fármaco na região (Hoffman-Antenbrink *et al.*, 2009).

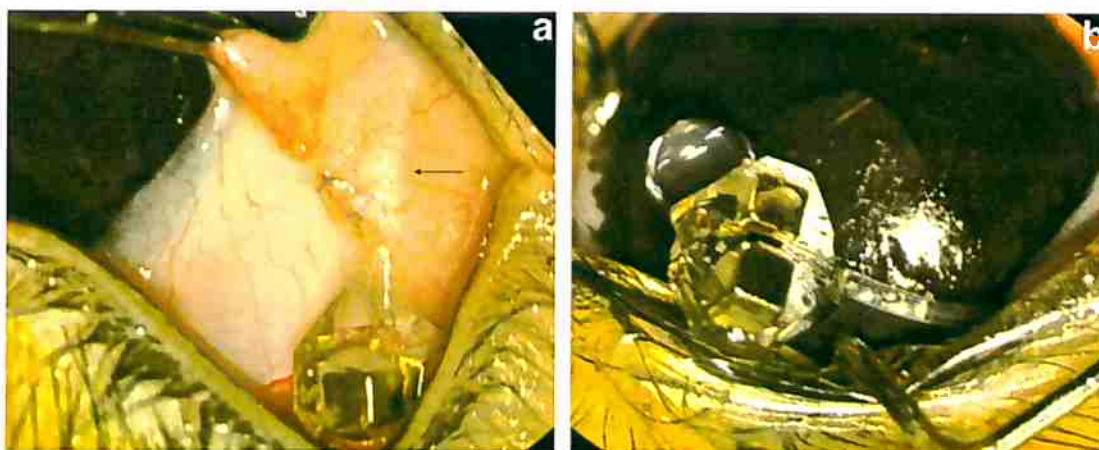
A Figura 1.3 ilustra uma válvula aplicada no olho de um coelho com partículas magnéticas usada no tratamento do glaucoma, neste caso a fixação do elemento magnético é parcial e está limitada a pressão do líquido do olho. Quando a pressão do olho excede a força magnética que atrai o elemento magnético, a válvula abre-se e o líquido no interior do olho é expelido reduzindo assim a pressão do olho que agora é menor que a força magnética que atrai o elemento magnético e a válvula, mais uma vez, fecha-se (Paschalis *et al.*, 2013).

Ainda no contexto de tratamentos de doenças no globo ocular, encontramos o tratamento do deslocamento de retina (Mefford *et al.*, 2007) o qual, vale destacar, motivou grande parte do presente trabalho. A Figura 1.4 ilustra o olho humano com algumas de suas principais partes em destaque,



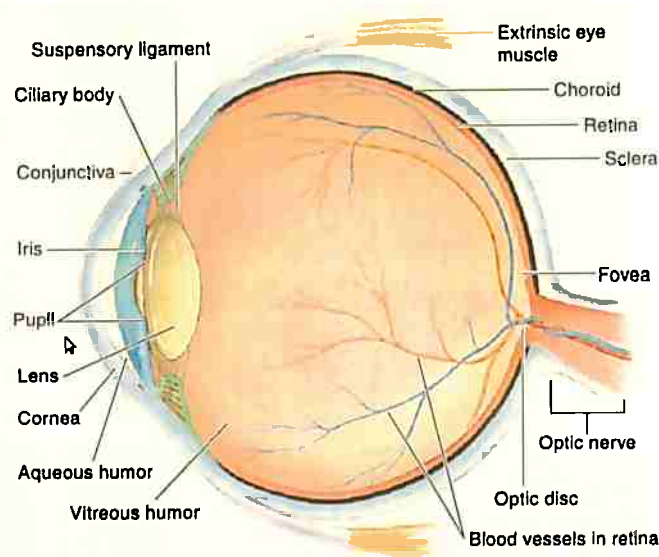


**Figura 1.2:** Nanopartículas magnéticas com medicamento foram injetadas nas articulações e mantidas por magnetos permanentes extracorporais fixados por curativos. Adaptado de *Hoffman-Antenbrink et al. (2009)*.



**Figura 1.3:** Implante de uma válvula com ferrofluido no olho de um coelho confeccionada para o tratamento de glaucoma. Seta preta indica o túnel sub-conjuntival sobre o tubo da válvula. (A conjuntiva é uma membrana mucosa presente nos olhos dos vertebrados que reveste a parte interna da pálpebra e a superfície exposta da córnea, revestindo igualmente a parte posterior da pálpebra que prolonga-se para trás para recobrir a esclera, veja Figura 1.4). A) O invólucro permanece no exterior na parte inferior do fundo do fórnix. B) Escoamento do humor aquoso é mostrado no coelho vivo. Adaptado de *Paschalis et al. (2013)*, com licença de reuso.

entre elas a retina, o coróide, o humor vítreo, a esclera. O descolamento de retina é a maior causa de perda de visão em adultos. Isso ocorre quando a retina separa-se do coróide, resultando numa morte eventual da retina e subsequentemente perda da visão. Como parte normal do envelhecimento, o humor vítreo normalmente está sujeito a liquefação, colapso e separação da retina (Foos e Wheeler, 1982; Larsson e Österlin, 1985) como representado na Figura 1.5. A separação do humor vítreo pode resultar na formação de uma abertura na retina no lado de adesão entre a retina e o humor vítreo (Spencer *et al.*, 1970). A abertura da retina produz um caminho para fluido vítreo para passar através e por baixo da retina, aumentando a sucção de atração da retina para o coróide, assim deslocando a retina a partir do coróide (Schepens e Balm, 1950) (Figura 1.5). A incidência anual desse tipo de deslocamento de retina regnato gênico (quando o fluido da cavidade vítrea passa através de uma ruptura na retina) em algumas populações estudadas varia de 6.9 a 17.9 casos por  $10^5$



**Figura 1.4:** Corte sagital do olho humano mostrando a retina (retina), o coróide (choroid), o humor vítreo (vitreous humor), a esclera (sclera). Adaptado de Sherwood (2010).

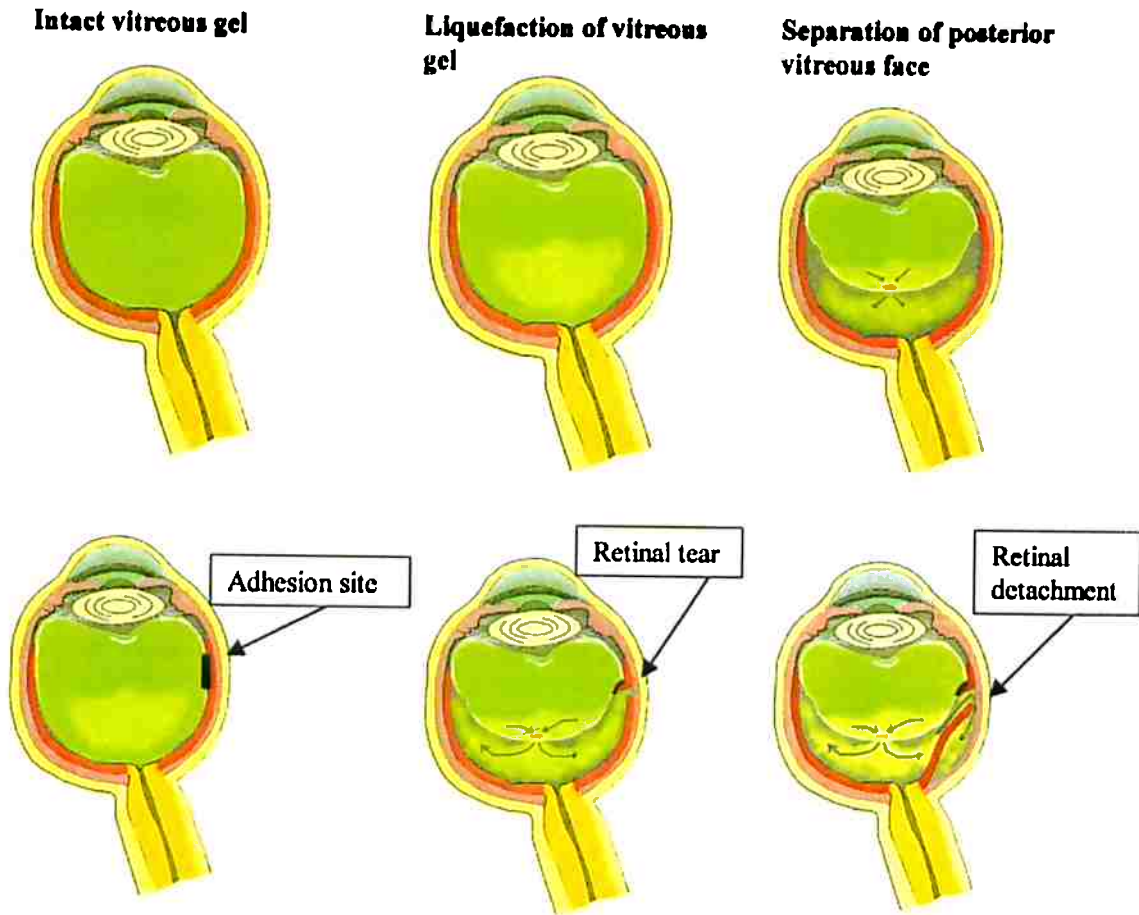
habitantes (Haimann *et al.*, 1982; Laatikainen *et al.*, 1985; Limeira-Soares *et al.*, 2006; Rowe *et al.*, 1999). Os tratamentos disponíveis atualmente para deslocamento de retina falham em até 1/3 dos pacientes com casos complicados de deslocamento de retina, resultando numa perda parcial ou total da visão de milhões de pessoas em todo o mundo (Mefford *et al.*, 2007). Um procedimento cirúrgico alternativo com ferrofluido é proposto para o tratamento do deslocamento da retina. O objetivo do procedimento sobre a retina é fechar seus orifícios, prevenindo que mais fluido escoe no espaço abaixo dela, permitindo seu reposicionamento (Dailey *et al.*, 1999). Uma pequena quantidade de ferrofluido é injetada na cavidade do humor vítreo do olho e guiada por um campo magnético permanente inserido no lado exterior da parede da esclera do olho. A gota desloca-se em direção ao lado do olho, até que ela possa selar o orifício na retina (Dailey, 2003; Dailey *et al.*, 1999), a Figura 1.6 ilustra o procedimento. Entender o movimento de uma gotícula enquanto migra no interior do olho e o campo magnético necessário para atrair a gotícula num tempo razoável são fatores importantes para o sucesso do procedimento (Mefford *et al.*, 2007).

Simulações numéricas de problemas que envolvem escoamentos bifásicos com uma das fases sendo um ferrofluido fornecem uma abordagem alternativa eficaz para obter um melhor entendimento sobre o comportamento de gotículas de ferrofluido sob a ação de um campo magnético (Shi *et al.*, 2014). O desenvolvimento de um modelo numérico capaz de simular com precisão os escoamentos interfaciais de ferrofluido é um suplemento valioso para testes e experimentos físicos e no desenvolvimento de novas aplicações de ferrofluido (Lee *et al.*, 2010). O Capítulo 1 encontra-se assim distribuído: os objetivos estão listados na Seção 1.1; as propriedades de surfactantes e algumas metodologias numéricas são apresentadas, no contexto de surfactantes insolúveis, na Seção 1.2; de maneira similar, ferrofluidos e uma breve revisão da literatura de metodologias numéricas são apresentados na Seção 1.3; algumas relações da combinação de ferrofluidos com surfactantes são abordadas e metodologias numéricas nesse contexto são citadas na Seção 1.4. O presente capítulo termina com a descrição da estrutura do trabalho na Seção 1.5.

## 1.1 Objetivos

A metodologia numérica aqui empregada teve início com os trabalhos de Roma (1996) e Roma *et al.* (1999) com os quais foi introduzida uma versão adaptativa do método da fronteira

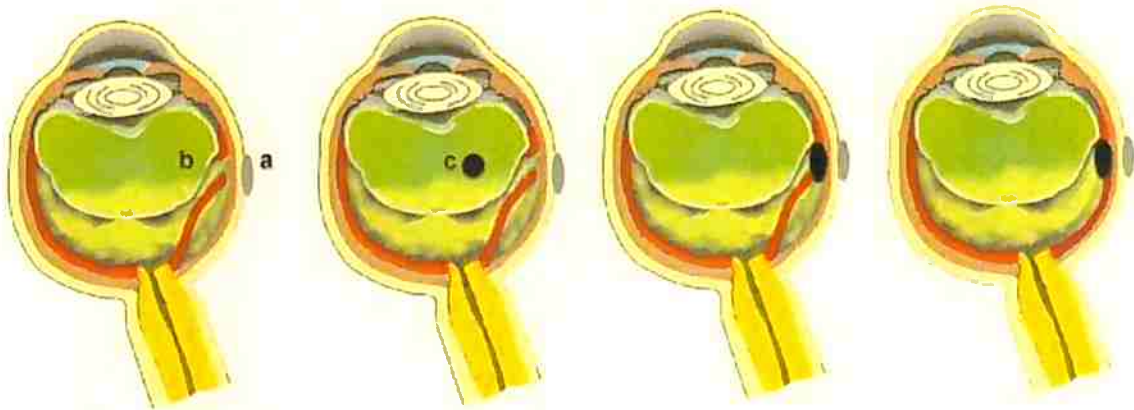




**Figura 1.5:** Acima a degeneração no humor vítreo (“vitreous gel”), abaixo o local da adesão (“adhesion site”) entre a retina e o humor vítreo e subsequentemente o dilacerar da retina (“retina tear”) seguido do deslocamento de retina (“retina detachment”). Adaptado de Dailey *et al.* (1999), com licença de reuso.

inmersa para a resolução de um escoamento bidimensional incompressível descrito pelas equações de Navier-Stokes para um fluido monofásico. Villar (2007) e Ceniceros *et al.* (2010b) estendem o trabalho de Roma e colaboradores para um escoamento transiente bifásico bidimensional e, em três dimensões, Nós (2007) e Ceniceros *et al.* (2010a) empregam refinamento adaptativo de malhas (*adaptive mesh refinement* (AMR)) para modelos de campo de fase ao invés do método da fronteira imersa. Recentemente, Pivello (2012) e Pivello *et al.* (2014), tendo por base o trabalho de Nós e colaboradores, implementam o método da fronteira imersa em três dimensões para simular um escoamento transiente bifásico de ascensão de bolhas. O presente trabalho parte da implementação da técnica AMR e do método da fronteira imersa, realizados por Pivello e colaboradores, incorporando tanto a dinâmica de surfactantes insolúveis quanto a contribuição de um tensor magnético.

O trabalho ora presente pretende desenvolver o arcabolo teórico e numérico necessários a futuras simulações computacionais da dinâmica de surfactantes, da distribuição do campo magnético no domínio e da evolução da interface de separação em um escoamento bifásico visando ao auxílio do planejamento de sistemas de entrega e de manipulação de fármacos no organismo. Ele tem como principal objetivo desenvolver uma metodologia que tenha a maior acurácia e eficiência possíveis, com as ferramentas a que propõe-se empregar, para simular computacionalmente a dinâmica de escoamentos transientes incompressíveis bifásicos com fases imiscíveis, cuja interface de separação está sujeita a uma força de tensão superficial sujeita à influência da concentração de um elemento



**Figura 1.6: Procedimento cirúrgico para o tratamento de deslocamento de retina com ferrofluido:** (1) Um magneto permanente (a) com um campo magnético pré-alinhados é colocado na extremidade próxima ao deslocamento de retina (b), (2) uma gotícula de ferrofluido (c) é injetada no humor vítreo, (3) atraída pelo magneto a gotícula de ferrofluido fecha o orifício na retina e (4) o corpo absorve o líquido acumulado abaixo da retina. Adaptado de Mefford et al. (2007), com licença de reuso.

surfactante insolúvel. Uma das fases pode ser um componente ferrofluido e a outra fase um fluido newtoniano, isotérmico, não magnetizável e não condutor de eletricidade. Nesse escoamento as principais forças atuantes são a de tensão superficial (de contato) e a magnética (de corpo).

São os objetivos específicos:

1. incorporar a dinâmica de surfactante insolúvel com uma equação de advecção-difusão sobre a interface com boas propriedades de conservação de massa total do surfactante,
2. incorporar na força de tensão superficial a contribuição da concentração de surfactante;
3. discretizar e incorporar o tensor magnético ao modelo atual para a simulação de escoamentos com ferrofluidos.

## 1.2 Surfactantes

Surfactantes são componentes químicos *anfifílicos* ou *anfipáticos*, isto é, possuem uma parte com afinidade para um meio apolar e uma parte com afinidade com um meio polar. Suas moléculas formam monocamadas orientadas na interface e mostram atividade superficial (em geral reduzem a tensão superficial ou interfacial do meio no qual estão dissolvidas). Algumas vezes, surfactantes são definidos como moléculas capazes de associar-se na forma de *micelas* (um agregado de moléculas numa solução coloidal, tais como os que são formados por detergentes). Esses componentes são chamados surfactantes *amphiphiles* (do grego *amphis*: ambos, *philia*: amor, amizade), agentes ativos na superfície, tensoativos, ou na literatura muito antiga, sais de cadeias de parafina (*paraffin-chain salts*) (Schramm, 2000, p. 5). O termo surfactante é o termo empregado na maior parte dos trabalhos estudados e o adotado pelo presente trabalho.

A interface entre fases imiscíveis é raramente limpa e a presença de “impurezas” (surfactantes) pode interferir consideravelmente na dinâmica do sistema por alterar as propriedades da tensão superficial. Isso é particularmente verdadeiro quando uma fração considerável da massa total do sistema está presente na interface das fases (e.g. emulsões, espumas e na dispersão de sólidos) (Rosen e Kunjappu, 2012, p. 2). A compreensão da dinâmica interfacial resultante permite prever as propriedades do escoamento em muitas aplicações práticas importantes tais como o controle do tamanho de gotas em medicamento (Freitas et al., 2005), no tratamento de várias doenças do pulmão associadas com anormalidades com surfactantes (Griese, 1999), na criação e estabilização de estruturas na indústria de alimentos (Kralova e Sjöblom, 2009), na exploração de

petróleo, detergentes domésticos, na fabricação de cosméticos, na irrigação e solubilização para a agricultura (Rosen e Kunjappu, 2012).

Muitos métodos numéricos têm sido propostos nos últimos anos no contexto de surfactantes insolúveis, isto é, os surfactantes que aderem à interface não difundindo para as fases. Além de acoplar um código para o escoamento bifásico, é necessário a discretização do modelo matemático descrevendo a dinâmica de surfactante, uma equação diferencial parcial dependente no tempo definida apenas na interface de separação.

No contexto de códigos para simular escoamentos baseados nas metodologias de captura de interface (*front-capturing*) empregando o método de volume de fluido (*volume of fluid method* - VoF) ou o método de curva de nível (*level set method* - L-S), estende-se a equação de surfactante para uma banda estreita em torno da interface de separação onde é resolvido na malha euleriana. Empregando VoF, James e Lowengrub (2004) atinge conservação exata de massa total de surfactante com um esquema de volumes finitos para a equação de concentração de surfactante em simulações axissimétricas de uma gota submetida num escoamento extensional de Navier-Stokes, enquanto Drumright-Clarke e Renardy (2004) realiza simulações tridimensionais de uma gota submetida a um escoamento cisalhante com uma abordagem tipo VoF, resolvendo a equação de surfactante como uma terceira fase em torno da interface. Empregando L-S, Xu *et al.* (2006) incorpora apropriadamente saltos através da interface emprestando ideias do método da interface imersa (*immersed interface method*) para estudar gotas isoladas e a interação entre múltiplas gotas em um escoamento cisalhante bidimensional de Stokes. A perda de massa, inferior a 1%, é controlada "por reescalamto". Recentemente, Xu *et al.* (2012) propõe uma abordagem L-S também para a equação da concentração de surfactante para simulações em duas e três dimensões de gotas num escoamento de Navier-Stokes (algumas com propriedades materiais variáveis). Em combinação com seu código L-S para resolver o escoamento, Teigen *et al.* (2010) emprega o método do fluido fantasma (*ghost-fluid method*) e Teigen e Munkejord (2010) uma abordagem L-S para a equação de concentração de surfactante, para estudar o efeitos de campos elétricos em escoamentos interfaciais bidimensionais. Esses trabalhos reportam que a presença de surfactante insolúvel pode aumentar ou reduzir a deformação da gota, dependendo do formato da deformação e da direção da circulação elétrica induzida. Yang e James (2007) captura a interface de separação com um método acoplado L-S/VoF. Nesse trabalho a evolução da função de curva de nível (*level set function*), fração de volume (*volume fraction*), concentração de surfactante e a área interfacial são calculados usando um método lagrangiano-euleriano arbitrário (*arbitrary lagrangian-eulerian* (ALE) *method*) numa malha bidimensional, não estruturada com refinamento dinâmico próximo da interface para todo passo no tempo.

No contexto de códigos para simular escoamentos baseados em metodologias de acompanhamento de interface (*front-tracking*), tais como os métodos da fronteira integral (*boundary integral*), de elementos finitos (*finite element*) e de fronteira imersa (*immersed boundary*), um conjunto de pontos da interface é armazenado e acompanhado no tempo onde a equação de concentração de surfactante pode ser resolvida numa maneira lagrangiana. Diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos estão entre as abordagens mais populares para essa finalidade. Dentro da metodologia de fronteira imersa com as equações de Navier-Stokes bidimensionais, Ceniceros (2003) realiza simulações computacionais bidimensionais para verificar como a capilaridade altera dramaticamente na presença de surfactantes insolúveis, e Lee e Pozrikidis (2006) estuda gotas neutras à flutuação (*neutrally-buoyant drops*) deformando em um escoamento cisalhante num canal, para uma pequena razão de viscosidade. Diferenças finitas são aplicadas para a equação de concentração de surfactante insolúvel no primeiro trabalho e uma discretização por volumes finitos no último. Lai *et al.* (2008) propõe uma discretização para a equação de concentração de surfactante baseada no método de Crank-Nicolson que conserva a massa de surfactante com precisão de máquina em uma simulação bidimensional de gotas num escoamento cisalhante. Essa metodologia, recentemente estendida, é aplicada em simulações axissimétricas de gotículas num escoamento extensional (Lai *et al.*, 2011). Em três dimensões, Yon e Pozrikidis (1998) usa o método de elementos de fronteira (*boundary-element method*) para enfrentar um escoamento completamente tridimensional de Stokes com um



erro de  $O(10^{-4})$  por passo no tempo, uma abordagem similar foi empregada por *Bazhlekov et al.* (2006) com um erro na massa de surfactante menor que 0.5%. *Ganesan e Tobiska* (2009) emprega uma abordagem ALE para acompanhar a interface de separação por uma malha em movimento. A coleção de arestas/faces, que aproximam a superfície livre, são usadas ao mesmo tempo como o domínio computacional para a equação de surfactante que é resolvida numa maneira lagrangiana por um método de elementos finitos. Simulações axissimétricas são realizadas exibindo excelentes propriedades de conservação, mesmo sem uma correção por reescalamiento da massa de surfactante. *Hameed et al.* (2008) usa uma malha adaptada ao formato da bolha imersa (*body-fitted grid*) e uma metodologia ALE axissimétrica para as equações de Navier-Stokes obtendo conservação de massa de surfactante com erro de arredondamento da máquina.

Tem havido também o desenvolvimento de outras abordagens menos exploradas. *Frijters et al.* (2012) emprega o método *lattice Boltzmann* para estudar gotículas submetidas a um escoamento cisalhante, comparando os efeitos de surfactantes e nano partículas como aditivos na interface fluido-fluido em simulações tridimensionais. *Khatri e Tornberg* (2011) divide a interface em vários “segmentos”, cada um como gráfico com uma possível representação diferente por uma função de  $x$  ou  $y$ . Essa representação explícita da interface definida numa malha uniforme permite usar esquemas de diferenças finitas para resolver as equações numericamente realizadas para uma gotícula bidimensional submetida a um escoamento cisalhante. Baseado na metodologia SPH (*smoothed particle hydrodynamics*) para um escoamento multifásico, *Adami et al.* (2010) propõe um método lagrangiano de partículas que incorpora o surfactante como uma quantidade escalar descrevendo a concentração local de moléculas nas fases e sobre a interface.

O presente trabalho emprega um método de acompanhamento de interface para resolver o escoamento com capacidades de refinamento adaptativo para realizar simulações completamente tridimensionais de escoamentos dependente no tempo, bifásico, na presença de um elemento surfactante insolúvel. A interface de separação é representada por uma malha não estruturada, com triângulos geodésicos onde um esquema de volumes finitos é empregado para resolver a equação da concentração de surfactante. Os principais ingredientes formando a presente metodologia foram introduzidos recentemente em diferentes contextos (*Lenz et al.*, 2011; *Pivello et al.*, 2014; *Pozrikidis*, 2004) e, aqui, são combinados e aplicados pela primeira vez. Conservação global de massa é atingida em todos os casos com conservação local sendo alcançada com precisão de máquina sobre certas circunstâncias.

### 1.3 Ferrofluidos

Ferrofluidos, também conhecidos como fluidos magnéticos, são suspensões *coloidais* (suspensões de pequenas partículas num meio contínuo) sintéticas compostas por nanopartículas magnéticas sólidas, revestidas com um surfactante (ou carregadas eletricamente) e suspensas num líquido carregador. Em geral, as partículas são de magnetita com diâmetro na ordem de 3 nm a 15 nm, enquanto que o líquido carregador é tipicamente à base de óleo ou de água. A agitação térmica mantém as partículas suspensas devido ao movimento Browniano e o surfactante (ou a carga elétrica nas partículas) previne a agregação de partículas umas às outras (*Massart*, 1981; *Massart et al.*, 1995; *Rosensweig*, 1997). Um ferrofluido típico contém em torno de  $10^{23}$  partículas por metro cúbico e é opaco na luz visível. Entretanto, ferrofluidos opticamente transparentes e coloridos são reportados na literatura (*Rosensweig*, 2001; *Ziolo et al.*, 1992).

A influência exercida por um campo magnético, mesmo um campo moderado, num ferrofluido permite um grande número de possibilidades para o controle de sistemas que contém uma fase com componente magnético. Como mencionado anteriormente, ferrofluidos estão presentes em diversas aplicações biomédicas tais como no tratamento de câncer por hipertermia (*Brusentsov et al.*, 2002), no realce de contraste para ressonância magnética (*Pankhurst et al.*, 2009) e na separação magnética de células (*Rosensweig*, 1996). Ferrofluidos são também empregados em diversas aplicações tecnológicas como, por exemplo, em vedação dinâmica (*Raj e Moskowitz*, 1990), em dissipadores de calor e em sistemas de amortecimento (*Berkovski et al.*, 1993, p. 167-170). Em

particular, sistemas bifásicos constituídos por gotículas de ferrofluido imersas num fluido Newtoniano têm um grande potencial tecnológico em importantes aplicações tais como o *design* de novos materiais (Melford *et al.*, 2007) e a entrega de fármacos (Alexiou *et al.*, 2002, p. 233)(Lubbe *et al.*, 2001; Voltairas *et al.*, 2002; Yue *et al.*, 2012).

Recentemente, diversos métodos numéricos tem sido propostos para simular computacionalmente o efeito de um campo magnético em ferrofluidos. Em tais métodos, a força magnética resultante da ação de um campo magnético no ferrofluido e no meio é calculada. Como exemplos, a seguir são citados alguns estudos sobre: o formato de equilíbrio de gotículas; instabilidades na interface de uma superfície; a deformação e a dinâmica de gotículas de ferrofluidos na presença de um campo magnético (Afkhani *et al.*, 2008; Shi *et al.*, 2014).

No contexto de códigos para estudar os formatos de equilíbrio de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético uniforme são apresentadas abordagens baseadas nos métodos de elementos finitos, de elementos de fronteira, de VoF ou volumes finitos. Nessas abordagens uma condição de acoplamento da interface com as equações do escoamento ou as de Maxwell e a força magnética precisam ser consideradas. A interface é capturada por um VoF, uma função cor ou por um método L-S. Lavrova *et al.* (2004) considerando magnetização linear e Lavrova *et al.* (2006) usando magnetização não linear apresentam simulações axissimétricas de uma gotícula de ferrofluido num escoamento estacionário de Navier-Stokes de um meio não condutor (ar). Em ambos os estudos, um método de elementos finitos é usado para o interior da gotícula enquanto que no exterior um método de elementos de fronteira é aplicado para as equações governantes. Nessas o acoplamento é realizado pelo balanço de forças na interface com a tensão superficial aplicada como uma condição de fronteira. A interface é deformável e representada por um spline cúbica. Os resultados numéricos de deformação como função do campo aplicado são comparados com resultados analíticos e experimentais presentes na literatura. Afkhani *et al.* (2010) apresenta resultados experimentais e numéricos explorando, além do formato de equilíbrio, a intensidade do campo magnético no interior de uma gotícula de ferrofluido hidrofóbica biocompatível. Usando VoF realiza simulações axissimétricas de um escoamento bifásico de Navier-Stokes numa malha uniforme deslocada com um campo magnético uniforme de intensidade variando de 0.397 a 837.950  $kA \cdot m^{-1}$ . Identifica que para baixas intensidades de campo magnético (0.397 a 6.931  $kA \cdot m^{-1}$ ) foi possível aproximar os dados experimentais utilizando-se um valor constante para o coeficiente de tensão superficial. Entretanto para altas intensidades de campo magnético (8.093 a 837.950  $kA \cdot m^{-1}$ ) foi necessário modificar o coeficiente de tensão superficial de acordo com o campo aplicado. Denotam que a mudança de tensão superficial provavelmente é dominada pelas mudanças físico químicas associadas com a natureza da não homogeneidade do ferrofluido e rearranjo das nanopartículas (e da quantidade de surfactante que reveste as nanopartículas) na superfície. Zhu *et al.* (2011) simula uma gotícula de ferrofluido tridimensional (abordagem axissimétrica) apoiada numa superfície super-hidrofóbica sobre o efeito de um campo magnético uniforme. O escoamento bifásico de fases imiscíveis é governado pelas equações de Navier-Stokes e Maxwell com uma magnetização não linear. Tais equações são resolvidas por um método de volumes finitos numa malha deslocada. A interface de separação dos fluidos é capturada por um método L-S.

Considerando códigos que estudam instabilidades na interface de uma superfície de ferrofluido sob a ação de um campo magnético imposto são listadas abordagens com um método de elementos finitos na resolução das equações governantes do ferrofluido compostas pelo balanço de forças na interface com a tensão superficial aplicada como condição de fronteira na interface. Nessas abordagens a interface é atualizada por uma condição cinemática ou capturada pela resolução de uma equação diferencial. Bashtovoi *et al.* (2002) resolve as equações do escoamento com a contribuição da força magnética usando magnetização linear numa geometria axissimétrica, com interface deformável. Simula a instabilidade de uma camada plana de ferrofluido que ocupa metade de baixo de um domínio e é limitado por um gás não magnetizável na parte de cima do domínio sobre a influência da gravidade e de um campo uniforme normal à superfície plana. Determina as características básicas do formato de uma superfície livre que aparece além da instabilidade e denota que se a magnetização do ferrofluido é menor que um valor limite (dependente do problema) a instabilidade na

superfície não aparece para qualquer valor de intensidade de campo magnético. *Matthies e Tobiska (2005)* e *Knieling et al. (2007)* resolvem as equações de Navier-Stokes e o potencial magnético com magnetização não linear numa malha tridimensional com formato de hexaedro. A equação bidimensional de Young-Laplace da superfície livre é resolvida numa malha quadrangular que é a projeção da malha tridimensional. *Matthies e Tobiska (2005)* simula uma camada de ferrofluido sem fronteira de profundidade finita. Para campos magnéticos aplicados com intensidade próxima a do valor crítico para que um pico ocorra (segundo a literatura). Obtém resultados de altura de picos muito próximos aos resultados teóricos existentes e a intensidade do campo magnético crítico é aproximada muito bem. *Knieling et al. (2007)* simula o crescimento das ondulações na instabilidade de Rosensweig para diferentes condições, aplicado para dois ferrofluidos com diferentes viscosidades e compara com resultados experimentais. Conclui que o ferrofluido de menor viscosidade tem maiores taxas de crescimento do que o mais viscoso. Obteve boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais quanto as taxas de crescimento e amplitude da crista da ondulação.

No contexto de códigos para estudar a deformação e a dinâmica de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético uniforme com abordagens baseadas no método VoF, a gotícula desloca-se por diferença de densidade ou pela força de atração de um magneto. A interface é capturada por um método VoF ou por uma função cor. *Korlie et al. (2008)* desenvolve, testa e aplica um método tipo VoF, numa malha retangular uniforme, para a simulação de um escoamento de Navier-Stokes bifásico com uma das fases sendo um ferrofluido sob a ação de um campo magnético uniforme imposto com magnetização linear e potencial magnético resolvido por um multigrid. A interface de separação das fases deformável é capturada por uma função cor. Simula a ascensão de bolhas de fluido newtoniano não magnético num ferrofluido e gotas de ferrofluido em queda livre num fluido newtoniano não magnético. Denotam que bolhas e gotas apresentam alterações semelhantes de forma, na presença de campos magnéticos verticais (direção da força da gravidade), devido a uma combinação de alongamento ao longo das linhas do campo e da dinâmica do escoamento para um pequeno número de Bond magnético. *Afkhami et al. (2008)* investiga numericamente o movimento de uma gotícula de ferrofluido num meio viscoso direcionado por um campo magnético externo aplicado numa geometria axissimétrica. Usando um método tipo VoF numa malha deslocada uniforme para resolver um escoamento de Navier-Stokes e potencial magnético com magnetização linear (e não linear para uma das aplicações). A interface de separação das fases é dada pela descontinuidade numa função cor que identifica as fases do escoamento. Simula uma gotícula de ferrofluido biocompatível imersa num fluido não magnetizável sendo atraída por um magneto. Em um dos casos os parâmetros físicos do fluido ao redor são ajustados para aproximar o interior do olho humano com uma magnetização não linear. Dados experimentais são usados, nessa simulação, no cálculo da suscetibilidade magnética e como base para a geração de condições de contorno. Estuda a influência de alguns parâmetros físicos na deformação e o tempo de deslocamento da gotícula colocada a uma distância do magneto é comparado com um experimento físico e uma estimativa numérica prévia na literatura. Denota que quanto maior a gota mais rápido ela desloca-se na direção do magneto e os tempos estimados estiveram muito próximos aos dados experimentais. Conclui que a deformação da gotícula influencia no tempo de deslocamento até o magneto.

Em todos esses estudos a força magnética foi calculada considerando-se as equações de Maxwell para um fluido não condutor de eletricidade e isotérmico. Nessa situação para o campo magnético  $\mathbf{H}$  no escoamento existe um potencial magnético  $\psi$ , calculado por uma equação de Laplace, satisfazendo  $\mathbf{H} = \nabla\psi$ . Esse campo é a base de cálculo para a força magnética presente no escoamento como descrito em detalhes na Seção 2.2.2.

Outros modelos matemáticos para a dinâmica de ferrofluidos são descritos por *Felderhof (2000)*; *Felderhof e Kroh (1999)*; *Shliomis (2001a,b, 2002)*; *Zaitsev e Shliomis (1968)*. Existe ainda abordagens com o uso de campos gradientes para posicionar ferrofluidos em microcanais (*He et al., 2003*), capilaridade (*Bashtovoi et al., 2005*) e o controle de outros sistemas (*Naletova et al., 2005a,b*; *Veguera e Dikansky, 2005*). Para maiores detalhes veja uma revisão nesse contexto em *Rinaldi et al. (2005)*.

O presente trabalho emprega um método de acompanhamento de interface para resolver o



escoamento com capacidades de refinamento adaptativo para realizar simulações completamente tridimensionais de escoamentos dependente no tempo, bifásico, com uma das fases sendo um ferrofluido, na presença de um campo magnético uniforme. A interface de separação é representada por uma malha não estruturada, com triângulos geodésicos.

Os principais ingredientes formando a presente metodologia foram introduzidos em diferentes contextos (Pivello *et al.*, 2014; Rosensweig, 1997), e aqui são combinados e aplicados pela primeira vez no contexto de escoamento completamente tridimensionais.

## 1.4 Ferrofluidos com surfactantes

Ferrofluidos biocompatíveis podem ser usados como carregadores de nanopartículas que encapsulam fármacos para que, seletivamente, liberem o medicamento em regiões específicas (Dobson, 2006). Estas nanoestruturas são frequentemente estabilizadas por moléculas de alguma substância surfactante (Rosensweig, 1997). Surfactantes podem melhorar ainda mais a eficácia farmacêutica dos medicamentos, controlando o volume das gotículas e sua distribuição estatística (Nowak *et al.*, 2014; Thurm e Odenbach, 2003), a morfologia, a química de superfície, a hidrofobicidade, a carga superficial e a eficiência de retenção do fármacos (Rosen e Kunjappu, 2012), além de influenciar o efeito “viscomagnético” (Meibod *et al.*, 2010). Outros efeitos de um surfactante na magneto-hidrodinâmica são relatados por Regmi *et al.* (2009).

Tendo como objetivo descrever detalhes do escoamento, prever a dinâmica de surfactante e da evolução da interface de separação com a maior acurácia e eficiência possíveis, o presente trabalho emprega um método de acompanhamento de interface para resolver o escoamento com capacidades de refinamento adaptativo para realizar simulações completamente tridimensionais de escoamentos dependente no tempo, bifásico, com uma das fases sendo um ferrofluido, sobre a ação de um campo magnético uniforme e na presença de um elemento surfactante insolúvel. A interface de separação é representada por uma malha não estruturada, dada por triângulos geodésicos sobre a qual esquema de volumes finitos é empregado para resolver a equação da concentração de surfactante. Os principais ingredientes formando a presente metodologia foram introduzidos em diferentes contextos (Lenz *et al.*, 2011; Pivello *et al.*, 2014; Pozrikidis, 2004; Rosensweig, 1997) sendo aqui combinados e aplicados pela primeira vez. Conservação global de massa de surfactante é atingida em todos os casos com conservação local sendo alcançada com precisão de máquina sobre certas circunstâncias. Essa abordagem, do nosso conhecimento, inédita no contexto da metodologia numérica adotada.

## 1.5 Organização

O presente trabalho está estruturado como a seguir. O Capítulo 2 apresenta o modelo matemático que descreve a dinâmica de escoamentos transientes incompressíveis bifásicos com fases imiscíveis. Nesses escoamentos, existe uma interface de separação sujeita a uma força de tensão superficial que sofre influência da concentração de um elemento surfactante insolúvel. Além disso, contém a descrição matemática do caso no qual uma das fases é um ferrofluido e a outra fase é um fluido newtoniano, isotérmico, não magnetizável e não condutor de eletricidade. As principais forças externas atuantes são a de tensão superficial (de contato) e a magnética (de corpo). No Capítulo 3, a discretização do domínio euleriano e a descrição dos operadores diferenciais são abordadas em malha uniforme e, posteriormente, para uma malha bloco-estruturada composta por refinamentos localizados empregando uma técnica de refinamento adaptativo de malhas (*Adaptive Mesh Refinement* (AMR)). Nele também encontram-se a discretização do domínio lagrangiano, dada por uma malha triangular não estruturada, e os operadores que nela serão aplicados: o operador “levantamento sobre a interface”, que fornece uma aproximação de segunda ordem para uma vizinhança dos vértices da malha, o operador de “otimização de malha”, que incrementa a qualidade da malha triangular, e o operador de “correção de volume” contido pela interface imersa. A função indicadora de fluidos, que auxilia na determinação das fases, é apresentada brevemente. A metodologia numérica para a solução de escoamentos incompressíveis bifásicos transientes é descrita iniciando-se pela descrição

de um métodos de projeção. Baseado no Teorema da Decomposição de Hodge (Chorin e Marsden, 1992), tal método desacopla a velocidade da pressão. No tempo, as equações são discretizadas por um esquema semi-implícito baseado numa metodologia implícita-explicita (IMEX) (Ascher *et al.*, 1995; Wang e Ruuth, 2008). Os domínios euleriano e lagrangiano são acoplados de maneira discreta, pela definição de uma função distribuição (função delta de Dirac discreta), que permite a construção dos operadores espalhamento e interpolação discretos, intrínsecos do método da fronteira imersa utilizado. O movimento da interface de separação entre as fases é realizado por um método de dois estágios com passo variável. Sobre esta interface a equação de advecção-difusão da concentração de surfactante é discretizada por um método de volumes finitos. A seguir as forças externas atuantes no escoamento são descritas, iniciando pela força interfacial, aproximada para cada elemento triangular da malha lagrangiana, seguida da força magnética que aparece na presença de uma fase magnética imersa e é calculada nos elementos de malha euleriana. O Capítulo 3 termina com um sumário da metodologia numérica descrita. No Capítulo 4, as verificações das implementações dos esquemas numéricos descritos nas discretizações das equações do escoamento da fase contínua são realizadas, na força magnética e na dinâmica de surfactante insolúvel. Tais verificações numéricas baseiam-se na estratégia de “soluções manufaturadas” para uma análise de convergência. No Capítulo 5, a validação da modelagem matemática aplicando as metodologias numéricas propostas neste trabalho é apresentada e os resultados são comparados com experimentos em laboratório e outros resultados numéricos da literatura. Nesse, a dinâmica de uma gotícula num escoamento cisalhante é simulada, estando a gotícula revestida ou não de um elemento surfactante. No Capítulo 5, a dinâmica de uma gotícula de ferrofluido em equilíbrio sob a ação de um campo magnético uniforme é também simulada. O campo magnético calculado numericamente no interior da gotícula é comparado com a solução analítica existente. A deformação e orientação de uma gota de ferrofluido num escoamento cisalhante simples é estudada, sendo este estudo, do nosso conhecimento, inédito no contexto apontado (escoamento totalmente tridimensional). O estado de equilíbrio estacionário é descrito e o a seguir o custo computacional da metodologia numérica empregada é discutido. No Capítulo 6 a metodologia numérica desenvolvida no presente trabalho é aplicada ao estudo de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante na presença de um campo magnético externo. Esse estudo se concentra nos efeitos da magnitude de campo magnético e de surfactante sobre a geometria e orientação da gotícula. Tais estudos são inéditos na literatura de ferrofluido e pretendem contribuir para ampliar e desenvolver os estudos de manipulação de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético externo. Determina-se o tamanho do domínio para uma aplicação com ferrofluido, baseado na influência do tamanho exercida nas deformações dos parâmetros geométricos da gotícula e na orientação. Outros fatores considerados são o número de células eulerianas utilizadas, o tempo computacional e o número de passo para o estado estacionário. A resolução dos domínios euleriano e lagrangiano é determinada a seguir, baseada na influência nas deformações dos parâmetros geométricos de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante, na razão entre as resoluções de malha eulerianas e lagrangiana, no número mínimo de células computacionais no interior de uma gotícula e no custo computacional. Usando o domínio e a resolução determinados realiza-se um estudo dos efeitos dos tipos de fases, da presença de surfactante e da influência de um campo magnético uniforme externo (quando uma das fases é um ferrofluido) sobre a deformação, orientação e vorticidade num escoamento cisalhante. O potencial do modelo como ferramenta de estudo de gotas de ferrofluido é ilustrado com alguns exemplos de análise. O Capítulo 7 apresenta as considerações finais relatando algumas contribuições e perspectivas para pesquisas futuras. O Apêndice A descreve a equação da dinâmica de surfactante para uma interface móvel. O Apêndice B apresenta a dedução da força interfacial. No Apêndice C alguns conceitos e notações necessários para a determinação da força magnética são apresentados. O Apêndice D apresenta a adimensionalização das equações que compõem o modelo de um escoamento bifásico com um componente magnético. O Apêndice E descreve o esquema de evolução da interface lagrangiana.



## Capítulo 2

# Modelagem matemática

O presente capítulo apresenta o modelo matemático que descreve a dinâmica de escoamentos transientes, incompressíveis e bifásicos com fases imiscíveis nos quais a interface de separação está sujeita a uma força de tensão superficial dependente da concentração de um elemento surfactante insolúvel. Em alguns casos, e este é um dos interesses do presente trabalho, uma das fases possui um componente ferrofluido e a outra fase é um fluido newtoniano isotérmico, não magnetizável e não condutor de eletricidade. As principais forças externas atuantes consideradas são a de tensão superficial (de contato) e, quando apropriado, a magnética (de corpo).

A Seção 2.1 apresenta a modelagem de escoamentos incompressíveis bifásicos cujas fases são imiscíveis e apresentam uma interface de separação definida e delgada. Para discernir a *fase dispersa* (e.g. bolhas ou gotas) da *fase contínua* (a outra fase), uma “função indicadora de fluido” é empregada no contexto de um método híbrido *front-tracking/front-capturing* (Ceniceros *et al.*, 2010c; Tryggvason *et al.*, 2001; Unverdi e Tryggvason, 1992). Por um lado, a posição dos pontos da interface de separação entre as fases é conhecida e “acompanhada explicitamente” por meio de uma metodologia lagrangiana (*front-tracking*) e, ao mesmo tempo, por outro lado, a posição da interface é considerada a “curva de nível zero” da função distância de um ponto do fluido até a interface. Esta última estratégia é típica de “métodos de captura de interface” (e.g. método da curva de nível - *level set method* (Osher e Sethian, 1988)). O fato dos pontos da interface serem acompanhados de maneira explícita permite ao método calcular de maneira eficiente a função distância (na verdade, ótima do ponto de vista da complexidade computacional). Tal função é empregada na identificação das fases. O escoamento é modelado pelas equações de Navier-Stokes cujo termo forçante é composto pela soma das forças externas atuantes (Seção 2.2), entre elas a força de tensão superficial descrita na Seção 2.2.1 e pela força magnética apresentada na Seção 2.2.2. O Capítulo termina com um resumo da modelagem matemática e apresenta algumas possíveis simplificações do modelo na Seção 2.3.

### 2.1 Escoamento incompressível de um fluido bifásico

O modelo matemático da dinâmica do escoamento de fluidos está embasado na mecânica clássica e na termodinâmica, satisfazendo os princípios físicos de conservação de quantidade de movimento, de massa e de energia. Euler, em 1755, formulou pela primeira vez matematicamente as equações do movimento de um fluido não viscoso (“fluido ideal”) (Batchelor, 2000; Euler, 1755). Os efeitos viscosos foram incorporados pelo engenheiro, matemático e físico francês Claude Navier em um trabalho publicado em 1822 (Navier, 1822), no qual deduziu equações para escoamentos viscosos incompressíveis isotrópicos. Tais equações para o movimento de um fluido viscoso foram deduzidas por Cauchy em 1828 e por Poisson em 1829 (Grattan-Guinness, 1990) para um escoamento compressível. Em 1843, Barré de Saint-Venant publicou uma dedução das equações não apenas para o caso laminar, considerado por Navier, mas também para escoamentos turbulentos (Saint-Venant, 1843). Entretanto, a pessoa cujo nome acompanha o de Navier para a equação de um fluido viscoso é o físico-matemático britânico George Gabriel Stokes. Em 1845, ele publicou a dedução

das equações viscosas (Stokes, 1845) da maneira que é encontrada na maioria dos textos atuais (Grattan-Guinness, 1990; Joseph, 2006; Zeytounian, 2012). A equação de Navier-Stokes modela matematicamente o escoamento compressível ou incompressível de fluidos viscosos.

As equações que modelam um escoamento transiente incompressível e isotérmico são expressas neste trabalho como (Landau e Lifshitz, 1969, p. 48), (Chorin e Marsden, 1992, p. 33)

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.2)$$

onde  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  representa o campo de velocidade,  $p$  a pressão,  $\rho$  a densidade de massa (massa específica) do fluido,  $\eta$  a viscosidade dinâmica ou molecular do fluido e  $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)$  são forças externas que atuam no fluido (e.g. força da gravidade, de tensão superficial e magnética). Note que em geral a viscosidade dinâmica é representada por  $\mu$ , mas no presente trabalho  $\mu$  representa a permeabilidade magnética. Em (2.1)-(2.2), as equações de Navier-Stokes são dadas por (2.1) e a da conservação de massa (da continuidade) por (2.2).

No presente trabalho, as equações (2.1)-(2.2) são resolvidas num domínio dado por um paralelepípedo retângulo  $\Omega$  com condições iniciais apropriadas e cujas condições de contorno podem ser uma combinação escolhida dentre as condições de Dirichlet, de Neumann e periódica. O fluido pode ser composto por até duas fases imiscíveis cujas propriedades materiais se mantêm constantes em cada fase, no espaço e ao longo do tempo. A interface de separação entre as diferentes fases está sujeita à força de tensão superficial. O ponto de partida para modelar tal escoamento é o “modelo de um fluido” proposto por Tryggvason e colaboradores (Tryggvason *et al.*, 2001; Tryggvason e Scardovelli, 2011; Unverdi e Tryggvason, 1992), tendo por base as equações de Navier-Stokes e de continuidade (2.1)-(2.2).

O modelo de um fluido requer a definição de uma “função indicadora de fluidos” para discernir as diferentes fases entre si: a fase dispersa, contida no interior da região delimitada pela interface de separação dada pela curva fechada simples  $S$ , denotada por  $\Omega_d$ , da fase contínua, definida por  $\Omega_c = \Omega - \Omega_d$ . Note que  $\Omega_d \cap \Omega_c = \emptyset$  e que  $S = \partial\Omega_d = \partial\Omega_c$ , onde  $\partial\Omega_d$  e  $\partial\Omega_c$  representam o contorno de  $\Omega_d$  e  $\Omega_c$ , respectivamente. Tipicamente, uma função indicadora de fluidos  $\phi$  é construída de tal maneira que satisfaça as propriedades:

1. ser pelo menos contínua em  $\Omega$  e é tal que
2.  $\phi < 0$  em  $\Omega_d$ ,  $\phi = 0$  sobre  $S$  e  $\phi > 0$  em  $\Omega_c$ .

Existem diversas formas de se obter  $\phi$ . Algumas opções comuns são resolver equações hiperbólicas (Ceniceros, 2003) ou elípticas (Tryggvason *et al.*, 2001) para todo o domínio euleriano em todo passo no tempo. Essas abordagens tem complexidade computacional dada em termos do número de pontos eulerianos e do método numérico utilizado na resolução dessas equações diferenciais parciais. Aqui, uma abordagem diferente é utilizada: uma técnica de Geometria Computacional (Mauch, 2000) é aplicada para obter uma  $\phi$  a um custo que depende linearmente do número de pontos lagrangianos (Ceniceros e Roma, 2005; Ceniceros *et al.*, 2010b; Pivello *et al.*, 2014). Note que dentre as abordagens citadas, a do presente trabalho é aquela com o menor custo computacional dado que o número de pontos lagrangianos é muito menor que o número de pontos eulerianos.

A distância com sinal de um ponto  $x$  do domínio à interface de separação é definida como  $\phi(x)$  (note que como o método utilizado é de acompanhamento de fronteira então a posição da interface é suposta conhecida todo o tempo). A distância com sinal é calculada apenas para pontos eulerianos numa faixa estreita com largura  $2\gamma$ , centrada na interface de separação, na qual  $\gamma$  é uma constante positiva selecionada previamente (a largura  $\gamma$  será discutida mais adiante). Fora dessa faixa,  $\phi$  é constante e assume o valor  $-\gamma$  ou  $+\gamma$ , dependendo se o ponto está no interior ou no exterior da região limitada pela interface de separação, respectivamente.

No contexto de “interface difusa”, uma versão suave de *Função de Heaviside* que depende da

função indicadora  $\phi$ , dada por (Yokoi, 2008)

$$H(\phi) = \begin{cases} 1, & \phi > +\gamma, \\ 0.5(1 + \phi/\gamma + \pi^{-1} \sin(\pi\phi/\gamma)), & |\phi| \leq +\gamma, \\ 0, & \phi < -\gamma, \end{cases} \quad (2.3)$$

é utilizada na presente metodologia para atualizar as propriedades materiais das fases que compõem o fluido. Esta função se anula na fase dispersa ( $\phi < 0$ ), varia de maneira suave numa zona de transição ( $|\phi| \leq +\gamma$ ) e é igual a 1 na fase contínua ( $\phi > 0$ ). A variação suave de  $H(\phi)$  na zona de transição entre as fases é importante para o tratamento numérico adequado da descontinuidade (na interface de separação) das propriedades materiais.

Denotando-se por  $\rho_d$ ,  $\eta_d$ ,  $\rho_c$  e  $\eta_c$  a massa específica e a viscosidade dinâmica da fase dispersa e da fase contínua respectivamente, com o auxílio de (2.3) a massa específica e a viscosidade dinâmica para cada ponto do domínio  $\Omega$  podem ser definidas como

$$\rho(\phi) = \rho_d + (\rho_c - \rho_d)H(\phi), \quad (2.4)$$

$$\eta(\phi) = \eta_d + (\eta_c - \eta_d)H(\phi). \quad (2.5)$$

No modelo de um fluido, o movimento da interface ocorre como no método da fronteira imersa proposto por Peskin, (Peskin, 1977, 2002). A interface de separação  $S$  é um conjunto de “marcadores lagrangianos”

$$\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t) = \mathbf{X}(X(\boldsymbol{\alpha}, t), Y(\boldsymbol{\alpha}, t), Z(\boldsymbol{\alpha}, t)),$$

onde  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2)$  é o “parâmetro lagrangiano” satisfazendo

$$S = S(t) = \{\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t) \mid \boldsymbol{\alpha} \in \Sigma_0\}, \quad (2.6)$$

na qual  $\Sigma_0$  é um domínio fixo. Cada ponto da interface  $\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)$  é advectado pelo escoamento com a velocidade local do fluido assumindo a condição cinemática para a evolução da interface e que a velocidade do fluido é contínua através da interface.

Pelas considerações anteriores, a descrição do escoamento evolui a partir de (2.1) e (2.2), para um modelo matemático dado por

$$\rho(\phi) \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_s + \mathbf{f}_m + \mathbf{f}_g, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(\boldsymbol{\alpha}, t) \doteq \mathbf{u}(\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t), t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)) d\mathbf{x}, \quad (2.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.10)$$

na qual  $\mathbf{f}_s$  e  $\mathbf{f}_m$  são a força de tensão superficial e a força magnética, descritas na Seções 2.2.1 e 2.2.2,  $\mathbf{f}_g$  é a força gravitacional e  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  pertence ao domínio euleriano. A expressão (2.9) define a operação de “interpolação” da velocidade (euleriana) do escoamento,  $\mathbf{u}$ , para os pontos da interface resultando na “velocidade lagrangiana” (dos pontos da interface).

O fato das propriedades materiais serem constantes em cada fase e da posição da interface de separação ser acompanhada ao longo do tempo para o cálculo de  $\rho(x, t)$  e  $\eta(x, t)$  são usados fortemente no presente modelo. Em geral, equações adicionais para transportar tais propriedades seriam necessárias.

## 2.2 Forças externas atuantes

As forças externas consideradas no presente trabalho atuantes nas equações de Navier-Stokes são descritas a seguir. Tais forças são representadas pelo termo  $\mathbf{f}$  em (2.7). Como força de contato

externa, apenas a força de tensão superficial foi considerada e, como forças de campo, a força gravitacional e a força magnética atuante quando uma das fases possui um componente magnético são adotadas no presente trabalho. Em determinadas situações, a serem discutidas oportunamente, a força de objetos imersos ( $\mathbf{f}_F$ ) é considerada.

### 2.2.1 Força de tensão superficial

A influência da tensão superficial no escoamento, contabilizada por uma parcela que compõe o termo forçante  $\mathbf{f}$  em (2.7), é abordada como no método da fronteira imersa proposto por Peskin, (Peskin, 1977, 2002): ela é “espalhada” ao fluido por intermédio da expressão

$$\mathbf{f}_s(\mathbf{x}, t) = \int_S \mathbf{F}_s(\boldsymbol{\alpha}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)) d\boldsymbol{\alpha}. \quad (2.11)$$

A força interfacial  $\mathbf{F}_s$ , deduzida no Apêndice B, é definida apenas sobre a interface de separação e é dada por

$$\mathbf{F}_s(\boldsymbol{\alpha}, t) = \nabla_s \sigma - \kappa \sigma \mathbf{n}. \quad (2.12)$$

Tal força está sujeita às alterações de curvatura e do coeficiente de tensão superficial. Seu primeiro termo, tangente à interface, é a “Força de Marangoni” cujo operador  $\nabla_s(\cdot)$  denota o gradiente superficial descrito no Apêndice A. O segundo termo depende de  $\kappa = \nabla_s \cdot \mathbf{n}$  (o dobro da curvatura média) e de  $\sigma$ , o coeficiente de tensão superficial. Tal termo é paralelo ao vetor normal unitário exterior à interface,  $\mathbf{n}$ .

Na presença de um elemento surfactante, considera-se que o coeficiente de tensão superficial varia sobre a interface. Admite-se que o surfactante é insolúvel e está aderido na interface, ou seja, não há troca de massa de surfactante através da interface.

A equação básica para transporte de surfactante sobre uma interface deformável e em movimento foi obtida por Scriven (1960), Aris (1962) e Waxman (1984). Em seus trabalhos, tais autores usam fortemente como ferramenta resultados de geometria diferencial. Numa outra abordagem, Stone (1990) apresenta um desenvolvimento baseado em princípios físicos da equação transiente de advecção-difusão que modela a dinâmica de um surfactante sobre uma interface móvel e deformável. Wong *et al.* (1996) apresenta uma forma alternativa de equação de transporte de surfactante e fornece uma interpretação da equação de Stone. Lai *et al.* (2008) deduz a equação de forma similar ao desenvolvimento de Stone, alterada por um argumento similar ao de Wong, definindo os operadores no caso particular de uma curva. Em 2008, Huang *et al.* (2008) apresenta uma nova dedução da equação da concentração de surfactante no mesmo espírito de Stone, porém com mais detalhes, mas ainda restrito a um caso particular de operadores diferenciais definidos sobre uma superfície.

Uma equação para a concentração de surfactante sobre a superfície de uma interface de separação entre fases pode ser obtida por intermédio de uma “lei de conservação de massa de surfactante”. Isto resulta numa equação de transporte dependente do tempo de advecção-difusão para a concentração de surfactante,  $\Gamma(\mathbf{x}, t)$ , da forma (quando adimensionalizada)

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + (\nabla_s \cdot \mathbf{U})\Gamma = \frac{1}{\zeta} \nabla_s \cdot (\nabla_s \Gamma), \quad (2.13)$$

na qual  $\mathbf{U}$  é a velocidade da interface lagrangiana que, no presente trabalho, é definida pela expressão (2.9) e  $\zeta$  é um parâmetro que controla o papel relativo da difusão e da convecção de transporte de surfactante sobre a interface. Um valor “pequeno” de  $\zeta$  corresponde a um transporte de surfactante sobre a interface com dominância da difusão enquanto um “grande” valor de  $\zeta$  indica que a maior quantidade de surfactante é transportada por advecção. Os operadores  $\nabla_s(\cdot)$  e  $\nabla_s^2(\cdot)$  representam o divergente e laplaciano superficiais, respectivamente. Para maiores detalhes sobre os termos da equação anterior e de sua dedução, assim como a descrição dos operadores sobre uma superfície,

veja o Apêndice A.

Aqui, a concentração de surfactante  $\Gamma$  é suposta ser diluída, isto é, longe do ponto de saturação. Neste contexto, o coeficiente de tensão superficial pode ser modelado por (Pozrikidis, 2011, p. 237)

$$\sigma(\Gamma) = \sigma_0(1 - \beta\Gamma), \quad (2.14)$$

que é a equação linear de estado (também conhecida como equação linear de Langmuir), na qual  $\sigma_0$  é o coeficiente de tensão superficial para uma superfície limpa (sem a presença de surfactante),  $\beta = \Gamma_0 RT/\sigma_0$ , composto pela concentração inicial de surfactante  $\Gamma_0$ , considerada uniforme, da constante dos gases  $R$  e da temperatura absoluta  $T$ .

Na ausência de surfactantes na interface de separação, assume-se que o coeficiente de tensão superficial,  $\sigma$ , é constante. Neste caso a força  $\mathbf{f}_s$  descrita pela equação (2.12) se reduz a

$$\mathbf{F}_s(\boldsymbol{\alpha}, t) = -\kappa\sigma \mathbf{n}. \quad (2.15)$$

### 2.2.2 Força magnética

A modelagem da força magnética atuante num escoamento bifásico com um componente fluido magnético utilizada no presente trabalho considera um escoamento incompressível, isotérmico e com duas fases imiscíveis. Para simplificar a apresentação, assume-se que existe apenas uma gotícula de fluido magnético ocupando a região  $\Omega_d$ , imersa num fluido newtoniano, isotérmico, não magnetizável e não condutor de eletricidade, ocupando a região  $\Omega_c$ , e uma interface de separação  $S$ . O domínio em forma de um paralelepípedo retângulo  $\Omega$ , um magneto (ímã) externo e uma gotícula de ferrofluido são representados na Figura 2.1. O campo magnético imposto pelo magneto externo,  $\mathbf{H}_0$ , interage com as partículas magnéticas da gotícula de ferrofluido por afetar sua magnetização,  $\mathbf{M}$ .

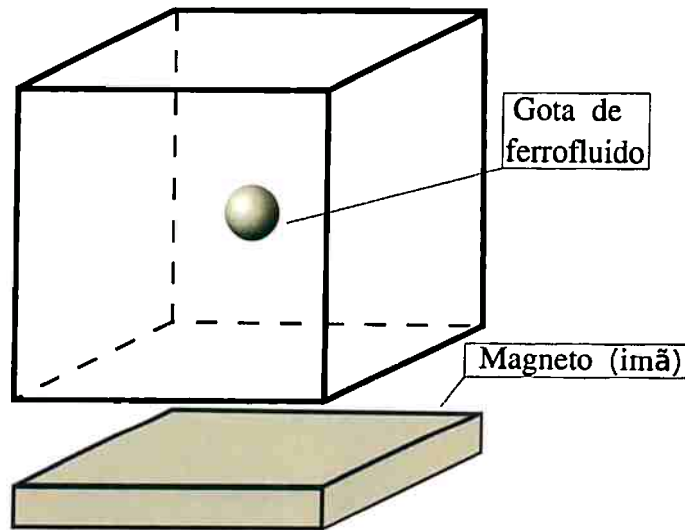


Figura 2.1: Gotícula imersa de ferrofluido sob a ação de um magneto.

A força agindo numa partícula magnética de momento magnético  $\mathbf{m}$  é  $\mu_0(\mathbf{m} \cdot \nabla)\mathbf{H}$  (Apêndice C.2), na qual  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{NA}^{-2}$  é a permeabilidade magnética no vácuo (note que, aqui,  $\mu$  representa a permeabilidade magnética - a viscosidade dinâmica, comumente representada por esse símbolo, é representada neste trabalho por  $\eta$ ). Para um corpo magnetizado, isso implica numa densidade de força (Rosenzweig, 1997)

$$\mathbf{f}_m = \mu_0(\mathbf{M} \cdot \nabla)\mathbf{H}. \quad (2.16)$$

Essa expressão para a força magnética, entretanto, não é válida na presença de uma interface na qual  $\mathbf{M}$  e  $\mathbf{H}$  são ambos descontínuos. Na presença de descontinuidade, usa-se uma forma alternativa



de força dada por (Afkhami *et al.*, 2008)

$$\mathbf{f}_m = ((\mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{H}) \cdot \nabla) \mathbf{H} = (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{H} - \mu_0 (\mathbf{H} \cdot \nabla) \mathbf{H}, \quad (2.17)$$

obtida com o uso da relação  $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$  entre o campo magnético, a magnetização e a indução magnética, descrita no Apêndice C.1 pela equação (C.3). Com a ajuda das identidades (Apêndice C.4)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{B} \otimes \mathbf{H}) &= \mathbf{H}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{H}, \\ \nabla(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}) &= 2(\mathbf{H} \cdot \nabla) \mathbf{H} + 2\mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{H}), \end{aligned}$$

e usando que a indução magnética  $\mathbf{B}$  e o campo magnético  $\mathbf{H}$  do sistema satisfazem  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  e  $\nabla \times \mathbf{H} = 0$ , (C.11) e (C.9) respectivamente, para um fluido não condutor de eletricidade teremos (Rosensweig, 1997)

$$\mathbf{f}_m = \nabla \cdot (\mathbf{B} \otimes \mathbf{H}) - \frac{1}{2} \mu_0 \nabla(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}). \quad (2.18)$$

Essa forma conservativa é válida na presença de descontinuidades na interface, dado que a mesma nesse caso é apropriadamente abordada com a função de Heaviside (2.3). Efetivamente toma-se o tensor magnético como sendo  $\mathbf{B} \otimes \mathbf{H}$  para o qual  $\otimes$  representa o operador produto tensorial. Para maiores detalhes sobre os operadores e identidades utilizados nessa seção veja o Apêndice C.4. O segundo termo,  $-(1/2)\mu_0 \nabla(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H})$  é proporcional ao divergente tensorial da matriz identidade e é absorvido pelo campo de pressão para todo o domínio, para maiores detalhes veja a discretização desse termo na equação (3.45) e as observações da Seção 3.6.3.

Para partículas magnéticas suficientemente pequenas ( $\approx 6nm$  de diâmetro), a magnetização se torna alinhada quase que instantaneamente com o campo magnético, i.e.

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H},$$

na qual  $\chi$  é a suscetibilidade magnética (que pode depender de  $|\mathbf{H}|$ , norma de  $\mathbf{H}$ , através da lei de magnetização de Langevin, (Langevin, 1905)). Nesse chamado “comportamento superparamagnético” temos

$$\mathbf{B} = \mu(\phi) \mathbf{H}, \quad (2.19)$$

na qual

$$\mu(\phi) = \mu_d + (\mu_c - \mu_d)H(\phi), \quad (2.20)$$

$\phi$  é a função indicadora de fluidos descrita na Seção 2.1,  $H(\phi)$  é a função de Heaviside descrita em (2.3), sendo  $\mu_d \doteq \mu_0(1 + \chi)$  e  $\mu_c \doteq \mu_0$  a permeabilidade magnética da fase dispersa e da fase contínua, respectivamente. Dado que  $\nabla \times \mathbf{H} = 0$ , existe um potencial escalar magnético  $\psi$  satisfazendo  $\mathbf{H} = \nabla \psi$ , então

$$\nabla \cdot (\mu(\phi) \nabla \psi) = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (2.21)$$

pois  $\mathbf{B} = \mu(\phi) \mathbf{H}$  e  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  (segundo as equações (2.19) e (C.11), respectivamente).

Simulações têm sido realizadas quase que exclusivamente nesse caso superparamagnético no qual  $\mathbf{M}$  é colinear com  $\mathbf{H}$ . Combinando as expressões (2.18) e (2.19) resulta que o tensor magnético é simplesmente (Afkhami *et al.*, 2008, 2010; Korlie *et al.*, 2008; Lavrova *et al.*, 2006; Séro-Guillaume *et al.*, 1992; Yue *et al.*, 2012; Zhu *et al.*, 2011)

$$\boldsymbol{\sigma}_m = \mu \mathbf{H} \otimes \mathbf{H} - \frac{1}{2} \mu_0 (\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}) \mathbf{I} \quad (2.22)$$

e a densidade de força magnética dada por

$$\mathbf{f}_m = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_m), \quad (2.23)$$

$$\text{ou seja, } \mathbf{f}_m = \nabla \cdot (\mu \mathbf{H} \otimes \mathbf{H}) - \frac{1}{2} \mu_0 \nabla (\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}). \quad (2.24)$$

## 2.3 Modelo matemático completo: uma síntese

O modelo matemático em foco descreve a dinâmica de um escoamento transiente e incompressível de um fluido bifásico sob a influência de dois tipos de forças externas atuantes: da força de tensão superficial e, possivelmente, de uma força magnética. A força de tensão superficial encontra-se sempre presente pois as fases que compõem o fluido são consideradas imiscíveis determinando, assim, uma interface de separação bem definida. Quando na presença de um elemento surfactante insolúvel, restrito à interface, a tensão superficial depende do tempo e da posição sobre a interface. Neste contexto, a dinâmica do escoamento pode ser alterada de maneira significativa. A Seção 2.3.1 apresenta o resumo da modelagem matemática no caso particular de um escoamento cujas fases são fluidos newtonianos imiscíveis na presença de um elemento surfactante sobre a interface. Neste caso as fases são newtonianas e a força magnética é nula.

A força magnética é não nula quando uma das fases possui um componente fluido magnético, é um ferrofluido. A Seção 2.3.2 resume o modelo nessa situação para um escoamento com a interface limpa, sem a presença de surfactante.

Para alguns casos, a serem discutidos oportunamente, outras forças podem ser adicionadas ao modelo, como a força gravitacional  $\mathbf{f}_g$  ( $\mathbf{f} \leftarrow \mathbf{f} + \mathbf{f}_g$ ) ou a força de objetos imersos  $\mathbf{f}_F$  ( $\mathbf{f} \leftarrow \mathbf{f} + \mathbf{f}_F$ ). O modelo matemático completo, inclusive contendo possivelmente um componente fluido magnético na presença de um surfactante insolúvel (veja fluxograma na Seção 2.3.3), pode ajudar no estudo de muitas questões em aberto na literatura sobre a síntese, a estabilidade e na dinâmica de ferrofluidos surfactados. Em particular, o estudo de algumas aplicações relacionadas à entrega e manipulação de fármacos no corpo humano (Afkhami *et al.*, 2008, 2010; Rosensweig, 1997; Tadmor *et al.*, 2000; Yue *et al.*, 2012).

### 2.3.1 Escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel

Um escoamento transiente incompressível cujo fluido é composto por duas fases imiscíveis em três dimensões é considerado. Sobre a interface de separação age uma força (singular) de tensão superficial que pode depender da concentração de um surfactante insolúvel. A Figura 2.2 ilustra a situação proposta.

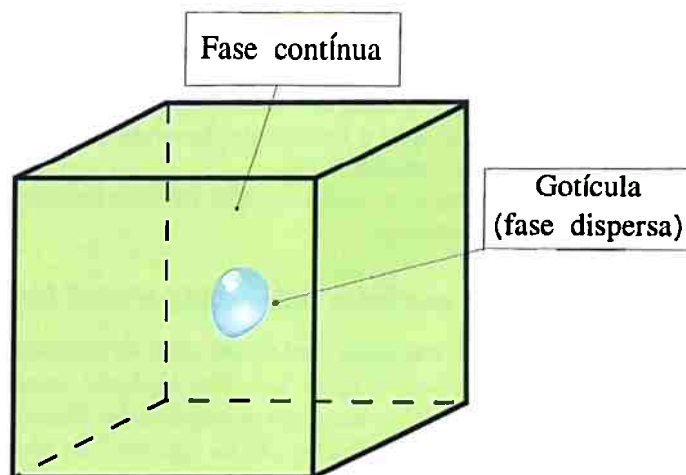


Figura 2.2: Gotícula imersa num fluido sujeito à tensão superficial.

Baseado na abordagem de “um fluido” (Tryggvason *et al.*, 2001; Tryggvason e Scardovelli, 2011; Unverdi e Tryggvason, 1992), apresentada em detalhes na Seção 2.1, o modelo matemático tira



vantagem do fato da interface entre fases ser explicitamente acompanhada de maneira lagrangiana para definir uma “função indicadora de fluido”,  $\phi$ , para atualizar as propriedades materiais. Neste contexto, na ausência de outras forças externas, o modelo matemático para o sistema é dado por

$$\rho(\phi) \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\phi)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \mathbf{f}_s, \quad (2.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.26)$$

$$\mathbf{f}_s(\mathbf{x}, t) = \int_S \mathbf{F}_s(\boldsymbol{\alpha}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)) dS, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(\boldsymbol{\alpha}, t) \doteq \mathbf{u}(\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t), t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)) d\mathbf{x}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{F}_s(\boldsymbol{\alpha}, t) = \nabla_s \sigma(\Gamma) - \kappa \sigma(\Gamma) \mathbf{n}, \quad (2.29)$$

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + (\nabla_s \cdot \mathbf{U})\Gamma = \frac{1}{\zeta} \nabla_s \cdot (\nabla_s \Gamma), \quad (2.30)$$

na qual (2.25) e (2.26) são as equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível discutidas na Seção 2.1. Aqui, supõe-se que a única força externa agindo no escoamento é a de tensão superficial, ou seja,  $\mathbf{f}$  em (2.7) escreve-se como

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_s, \quad (2.31)$$

onde  $\mathbf{f}_s$  é descrita por (2.11) e tem origem na força interfacial  $\mathbf{F}_s$  (veja Apêndice B). A força de tensão superficial é discutida em detalhes na Seção 2.2.1, para um coeficiente de tensão superficial que varia linearmente com a concentração de surfactante (2.29).

Em (2.30), tem-se a dinâmica de um surfactante insolúvel sobre a interface na forma de uma equação adimensional de advecção-difusão dependente do tempo. A Seção 2.2.1 descreve tal equação e a dedução da mesma pode ser encontrada no Apêndice A. A concentração de surfactante,  $\Gamma$ , é adimensionalizada pela concentração inicial de surfactante,  $\Gamma_0$ , sobre a interface, considerada uniformemente distribuída (i.e.  $\Gamma \equiv 1$  em  $t = 0$ ). O parâmetro  $\zeta$  é definido por  $\zeta = (a\sigma_0)/(\eta_c D_s) = Pe_s/Ca_0$ , na qual  $a$  é o raio da gota não deformada,  $\eta_c$  é a viscosidade da fase contínua,  $D_s$  é a difusividade superficial,  $Pe_s = (a^2 \dot{\gamma})/D_s$  é o número de Péclet superficial,  $Ca_0 = a\eta_c \dot{\gamma}/\sigma_0$  é o número de capilaridade correspondente à uma interface limpa e  $\dot{\gamma}$  é a razão de cisalhamento. Note que na ausência de surfactante insolúvel o coeficiente de tensão superficial,  $\sigma$ , é considerado constante e a equação (2.29) se reduz a equação (2.15).

Por fim, a expressão (2.28) representa a movimentação da interface de separação, a qual é realizada como no método da fronteira imersa.

### 2.3.2 Escoamento bifásico não condutor submetido a uma força magnética

Considere uma gotícula de ferrofluido suspensa num escoamento incompressível, newtoniano, não magnetizável e não condutor de eletricidade (Figura 2.1). Por hipótese, supõe-se que na presença de um campo magnético a gotícula é instantaneamente magnetizada. Neste contexto, as equações clássicas para a evolução dos dois sistemas de fluidos são as equações de Maxwell (Seção C.3), as equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível (Seção 2.1) e uma relação constitutiva para os vetores indução magnética  $\mathbf{B}$  ( $T$ ), campo magnético  $\mathbf{H}$  ( $A m^{-1}$ ) e magnetização  $\mathbf{M}$  ( $A m^{-1}$ ) (Lavrova *et al.*, 2006).

O ponto de partida para modelar tal escoamento é o modelo de um fluido descrito na Seção 2.1, no qual as equações de Navier-Stokes são resolvidas com o termo de forças externas que atuam no fluido

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_s + \mathbf{f}_m, \quad (2.32)$$

onde  $\mathbf{f}_s$  é discutida na Seção 2.2.1 e  $\mathbf{f}_m$ , a densidade de força magnética para um fluido não condutor

de eletricidade (Seção 2.2.2, expressão (2.24)), reproduzida a seguir, é

$$\mathbf{f}_m = \mu(\phi) \nabla \cdot (\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}) - \frac{1}{2} \mu_0 \nabla (\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}).$$

Tal força tem origem nas equações de Maxwell para um caso superparamagnético com magnetização linear, ou seja, quando  $\mathbf{M}$  é colinear com  $\mathbf{H}$  e apresenta uma relação constitutiva para a indução magnética  $\mathbf{B}$ , o campo magnético  $\mathbf{H}$  e a magnetização  $\mathbf{M}$  (detalhes na Seção 2.2.2).

O modelo torna-se completo indicando que o movimento da interface de separação ocorre como no método da fronteira imersa (Seção 2.1).

O modelo matemático a ser resolvido numericamente é dado por

$$\rho(\phi) \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}_s + \mathbf{f}_m, \quad (2.33)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{f}_s(\mathbf{x}, t) = \int_S (-\kappa \sigma \mathbf{n})(\alpha, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t)) d\alpha, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{f}_m = \mu(\phi) \nabla \cdot (\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}) - \frac{1}{2} \mu_0 \nabla (\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}), \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\alpha, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(\alpha, t) \doteq \mathbf{u}(\mathbf{X}(\alpha, t), t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\alpha, t)) d\mathbf{x}. \quad (2.37)$$

### 2.3.3 Modelo matemático completo: um diagrama esquemático

A Figura 2.3 mostra um diagrama de blocos que apresenta a modelagem matemática que descreve a dinâmica de um escoamento transiente, incompressível de um fluido bifásico possivelmente sob a influência de dois tipos de forças externas atuantes: a força de tensão superficial e uma força magnética. Quando a fase contínua é suposta newtoniana, não magnetizável e não condutora de eletricidade em todos os casos, mesmo quando a fase dispersa possui um componente ferromagnético.

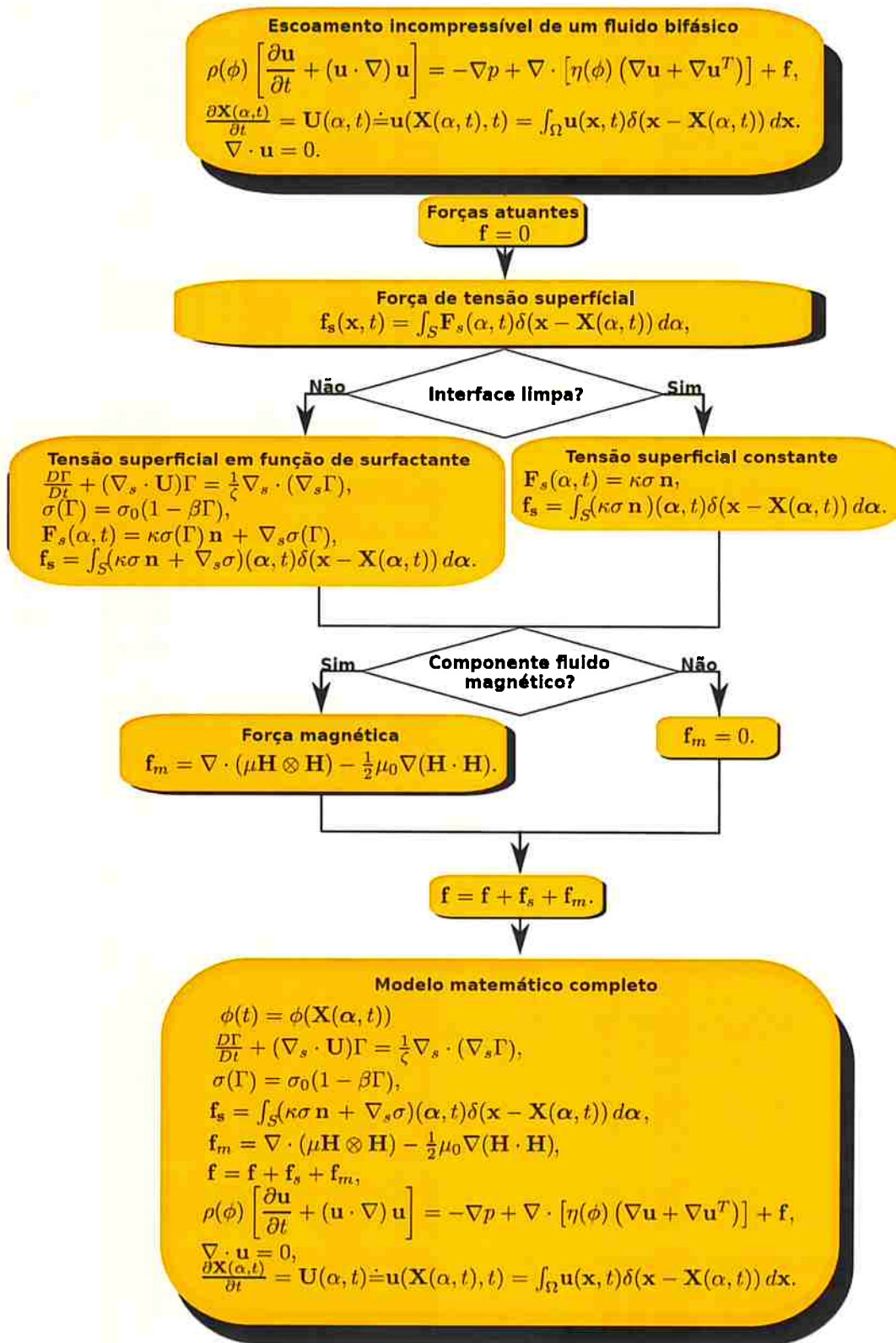


Figura 2.3: Modelo matemático de um escoamento incompressível e transiente de um fluido bifásico (fases imiscíveis). Uma das fases pode conter um componente ferromagnético.

## Capítulo 3

# Metodologia numérica

O presente capítulo inicia-se com a discretização do domínio euleriano e a descrição dos operadores diferenciais, apresentados inicialmente em uma malha uniforme na Seção 3.1, com o intuito de simplificar a exposição. Na seção subsequente, são apresentadas as alterações e particularidades requeridas para a extensão da discretização espacial para uma malha bloco-estruturada composta por refinamentos localizados realizados pela técnica AMR (*Adaptive Mesh Refinement*). A seguir, o domínio lagrangiano discretizado por uma malha triangular não estruturada é apresentado na Seção 3.3, assim como alguns operadores aplicados sobre a malha triangular. Entre eles o operador “levantamento” sobre a interface, que fornece uma aproximação de segunda ordem para uma vizinhança dos vértices da malha. Um operador de otimização de malha e uma correção do volume da interface imersa. A função indicadora de fluidos é apresentada brevemente na Seção 3.4. A metodologia numérica para a solução de escoamentos incompressíveis bifásicos transientes é descrita na Seção 3.5, iniciando pela descrição de um métodos de projeção inspirados nos trabalhos de Chorin (1968) e Temam (1969). Baseado no Teorema da Decomposição de Hodge (Chorin e Marsden, 1992), tal método desacopla a velocidade da pressão. No tempo, as equações são discretizadas por um esquema semi-implícito baseado numa metodologia implícita-explícita (IMEX) (Ascher *et al.*, 1995; Wang e Ruuth, 2008). Os domínios euleriano e lagrangiano são acoplados de maneira discreta, pela definição de uma função distribuição (função delta de Dirac discreta), que permite a construção dos operadores espalhamento e interpolação discretos. O movimento da interface de separação entre as fases é realizado por um método de dois estágios com passo variável. Sobre essa interface a equação de advecção-difusão da concentração de surfactante é discretizada por um método de volumes finitos. A seguir as forças externas atuantes no escoamento são descritas na Seção 3.6, iniciando pela força interfacial, aproximada para cada elemento triangular da malha lagrangiana, seguida da força magnética que aparece na presença de uma fase magnética imersa e é calculada nos elementos de malha euleriana. A Seção 3.7 finaliza o presente capítulo com um sumário da metodologia numérica descrita.

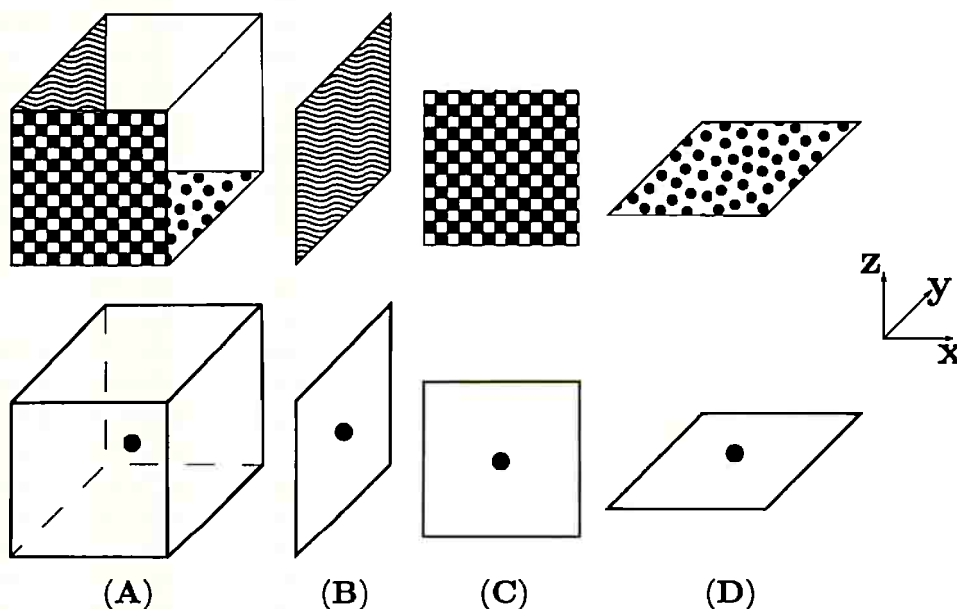
### 3.1 Domínio euleriano: malha uniforme

O domínio computacional considerado é um paralelepípedo dado pelo produto cartesiano  $\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times [A_3, B_3]$  que inicialmente é discretizado por uma malha uniforme cartesiana,  $\mathcal{G}_\Omega$ , orientada na direção dos eixos coordenados. A malha  $\mathcal{G}_\Omega$  está subdividida em  $n_x$  células de espaçamento  $\Delta x = \frac{B_1 - A_1}{n_x}$  no eixo  $x$ ,  $n_y$  células de espaçamento  $\Delta y = \frac{B_2 - A_2}{n_y}$  no eixo  $y$  e  $n_z$  células de espaçamento  $\Delta z = \frac{B_3 - A_3}{n_z}$  no eixo  $z$ . O espaçamento da malha é denotado como  $h$  quando  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ .

Uma certa quantidade de células cujos valores são dependentes das condições de contorno são agregadas em torno de todo o domínio. Estas células são conhecidas como “células fantasmas”, ou simplesmente “fantasmas”. A função dessas células é evitar que a forma dos operadores seja

alterada próximo à fronteira. A quantidade de células fantasmas na direção normal,  $n_g$ , é a mesma em cada uma das fronteiras ao redor do domínio  $\Omega$ . Os índices de uma célula fantasma  $(i, j, k)$  satisfazem  $(-n_g + 1) < i < 1$  ou  $n_x < i < (n_x + n_g)$ ,  $(-n_g + 1) < j < 1$  ou  $n_y < j < (n_y + n_g)$  e  $(-n_g + 1) < k < 1$  ou  $n_z < k < (n_z + n_g)$ .

As variáveis eulerianas são posicionadas numa malha deslocada introduzida por Harlow e Welch (1965). Assim, variáveis escalares como pressão, correção de pressão, densidade de massa, viscosidade, suscetibilidade e permeabilidade magnética são calculadas no centro da célula computacional; as componentes da velocidade, da força de interface e da força magnética, no centro das faces dessa célula. A principal razão da escolha da malha deslocada está no fato de que com ela é possível definir convenientemente aproximações de segunda ordem para os operadores divergente e gradiente, tal que facilita a implementação de um algoritmo *multigrid* para solucionar a equação de Poisson para a correção de pressão (Bell e Marcus, 1992; Bell *et al.*, 1989; Minion, 1996; Peyret e Taylor, 1983). A Figura 3.1 destaca as partes da célula computacional onde as variáveis discretas são calculadas.



**Figura 3.1:** Local da célula computacional onde variáveis discretas são calculadas: variáveis escalares como pressão, a densidade de massa, a viscosidade, a suscetibilidade e a permeabilidade magnética são calculadas no centro da célula computacional (A); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção  $x$  são calculadas no centro da face  $yz$  (B); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção  $y$  são calculadas no centro da face  $xz$  (C); as componentes da velocidade, da força de superfície e da força magnética na direção  $z$  são calculadas no centro da face  $xy$  (D).

Por simplicidade, assume-se que  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h$ . Para cada célula identificada pelos índices  $(i, j, k)$  a localização física do centro desta célula é denotada por  $\mathbf{x}_{i,j,k} = ((i + \frac{1}{2})h, (j + \frac{1}{2})h, (k + \frac{1}{2})h)$ . Como ilustrado pela Figura 3.1, se  $\varphi$  é uma variável escalar ela é aproximada no centro da célula, ou seja, nos pontos  $\mathbf{x}_{i,j,k}$ . As componentes de uma variável vetorial  $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ , são, respectivamente aproximadas no centro das faces  $yz$ ,  $xz$  e  $xy$ , isto é, nos pontos  $\mathbf{x}_{i-1/2,j,k} = (ih, (j + \frac{1}{2})h, (k + \frac{1}{2})h)$ ,  $\mathbf{x}_{i,j-1/2,k} = ((i + \frac{1}{2})h, jh, (k + \frac{1}{2})h)$  e  $\mathbf{x}_{i,j,k-1/2} = ((i + \frac{1}{2})h, (j + \frac{1}{2})h, kh)$ . O valor das variáveis vetoriais  $\boldsymbol{\psi}$  e das escalares  $\varphi$  armazenados nas malhas são denotados por  $(\psi_1)_{i-1/2,j,k}$ ,  $(\psi_2)_{i,j-1/2,k}$ ,  $(\psi_3)_{i,j,k-1/2}$  e  $\varphi_{i,j,k}$ .

As aproximações por diferenças finitas para os operadores gradiente, laplaciano e divergente são denotadas respectivamente por  $\mathbf{G}(\cdot) \approx \nabla(\cdot)$ ,  $\mathbf{L}(\cdot) \approx \nabla^2(\cdot)$  e  $\mathbf{D}(\cdot) \approx \nabla \cdot (\cdot)$ . Utiliza-se a discretização padrão em malhas deslocadas, na qual  $\mathbf{G}(\cdot)$  e  $\mathbf{L}(\cdot)$  são calculados nas faces das células e  $\mathbf{D}(\cdot)$  nos centros das células.

Na malha deslocada descrita anteriormente, os operadores de diferenças finitas para aproximar os operadores diferenciais espaciais são descritos a seguir. Para uma variável escalar  $\varphi$  e uma variável vetorial  $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ , localizadas em suas posições correspondentes mostradas na Figura 3.1, os seguintes operadores são definidos:

- Gradiente ( $\mathbf{G}$ )

$$\begin{aligned} (\mathbf{G}\varphi)_{i-\frac{1}{2},j,k} &= \frac{\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i-1,j,k}}{h}, \\ (\mathbf{G}\varphi)_{i,j-\frac{1}{2},k} &= \frac{\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j-1,k}}{h}, \\ (\mathbf{G}\varphi)_{i,j,k-\frac{1}{2}} &= \frac{\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j,k-1}}{h}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$(\mathbf{G}\boldsymbol{\psi})_{i,j,k} = ((\mathbf{G}\psi_1)_{i-1/2,j,k}, (\mathbf{G}\psi_2)_{i,j-1/2,k}, (\mathbf{G}\psi_3)_{i,j,k-1/2});$$

- Divergente ( $\mathbf{D}\cdot$ )

$$(\mathbf{D}\cdot\boldsymbol{\psi})_{i,j,k} = \frac{(\psi_1)_{i+1,j,k} - (\psi_1)_{i,j,k}}{h} + \frac{(\psi_2)_{i,j+1,k} - (\psi_2)_{i,j,k}}{h} + \frac{(\psi_3)_{i,j,k+1} - (\psi_3)_{i,j,k}}{h}; \quad (3.2)$$

- Laplaciano ( $\mathbf{L}$ )

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}\varphi)_{i,j,k} &= \frac{\varphi_{i+1,j,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i-1,j,k}}{h^2} + \frac{\varphi_{i,j+1,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j-1,k}}{h^2} \\ &\quad + \frac{\varphi_{i,j,k+1} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j,k-1}}{h^2}, \\ (\mathbf{L}\boldsymbol{\psi})_{ijk} &= ((\mathbf{L}\psi_1)_{i-1/2,j,k}, (\mathbf{L}\psi_2)_{i,j-1/2,k}, (\mathbf{L}\psi_3)_{i,j,k-1/2}), \end{aligned} \quad (3.3)$$

na qual para  $\psi_1$

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}\psi_1)_{i-1/2,j,k} &= \frac{(\psi_1)_{i+\frac{1}{2},j,k} - 2(\psi_1)_{i-\frac{1}{2},j,k} + (\psi_1)_{k,i-\frac{3}{2},j,k}}{h^2} + \frac{(\psi_1)_{i,j+1,k} - 2(\psi_1)_{i,j,k} + (\psi_1)_{i,j-1,k}}{h^2} \\ &\quad + \frac{(\psi_1)_{i,j,k+1} - 2(\psi_1)_{i,j,k} + (\psi_1)_{i,j,k-1}}{h^2}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

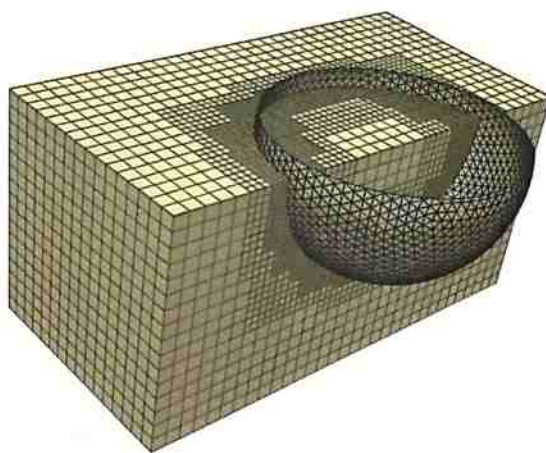
e formulações similares são usadas para  $\psi_2$  e  $\psi_3$ .

### 3.2 Domínio euleriano: malha composta

O domínio computacional euleriano é considerado um paralelepípedo retângulo, cuja discretização é dada por uma malha estruturada composta por blocos (paralelepípedos retângulos) que se adaptam e recobrem regiões específicas do domínio. Para a discretização, utiliza-se uma malha bloco-estruturada com refinamento adaptativo e dinâmico baseando-se na estratégia de refinamento adaptativo de malhas, (*Adaptive Mesh Refinement* - AMR), proposta por Berger e Olinger (1984), Berger e Rigoutsos (1991) e Berger e Colella (1989). Nessa técnica, refinamentos são obtidos pela união de "retalhos" (*patches*), cada qual dado por uma malha cartesiana bloco-estruturada tridimensional orientada na direção dos eixos coordenados. Uma grande vantagem dessa abordagem é que uma discretização originalmente definida em uma malha cartesiana uniforme pode ser facilmente reutilizada, além de possuir implementação computacional relativamente simples quando comparadas a outras técnicas de refinamento adaptativo, oferecem ainda grande vantagem no fato de possuírem relações de vizinhança de fácil acesso (cada retalho tem uma estrutura natural de



indexação). A seleção das regiões onde é necessária uma maior precisão pode ser feita, por exemplo, por intermédio de critérios baseados em propriedades físicas tais como altos gradientes, alta vorticidade e propriedades específicas do fluido. Em uma outra abordagem, (Berger e Olinger, 1984) selecionam os pontos que necessitam refinamento com base em uma estimativa do erro de discretização local. Para isto, empregam extrapolações de Richardson. Para simulações computacionais de escoamentos multifásicos, uma região natural de grande interesse é a vizinhança da interface de separação entre as fases, utilizada também pelo presente trabalho para definir o refinamento local, como ilustra a Figura 3.2. A implementação da técnica AMR neste trabalho teve início com o tra-



**Figura 3.2:** Corte de uma malha euleriana bloco estruturada com malha lagrangiana triangular não estruturada imersa no domínio euleriano.

balho de Roma (1996) e Roma *et al.* (1999) com uma versão adaptativa do método da fronteira imersa para a resolução de um escoamento bidimensional incompressível descrito pelas equações de Euler. Villar (2007) e Cenicerós *et al.* (2010b) estendem o trabalho de Roma e colaboradores para um escoamento transiente bifásico bidimensional descrito pelas equações de Navier-Stokes. Concomitantemente Nós (2007) e Cenicerós *et al.* (2010a) amplia o trabalho de Roma e colaboradores com a técnica AMR para um domínio tridimensional, utiliza um modelo de campo de fases ao invés do método da fronteira imersa para um escoamento tridimensional multifásico. A seguir Pivello (2012) e Pivello *et al.* (2014) tendo por base o trabalho de Nós e colaboradores implementa o método da fronteira imersa tridimensional para simular um escoamento transiente bifásico de ascensão de bolhas. O presente trabalho utiliza a implementação da técnica AMR e do método da fronteira imersa realizada por Pivello e seus colaboradores.

### 3.2.1 Descrição de uma malha composta bloco-estrutura

A descrição de malha composta bloco-estruturada utilizada no presente trabalho é baseada nas definições feitas por Berger e Colella (1989), Roma *et al.* (1999) e Cenicerós *et al.* (2010a).

Uma malha composta bloco-estrutura é formada por um conjunto de blocos (paralelepípedos retângulos) discretizados em diferentes níveis de refinamento, cada bloco é um conjunto de células computacionais. As faces de cada bloco estão alinhadas aos eixos coordenados do domínio computacional.

Considere  $G_{l,m}$  como sendo o  $m$ -ésimo bloco de uma nível de refinamento  $l$ . Os blocos que compõem um nível de refinamento  $l$  tem o mesmo espaçamento  $\Delta x_l$ ,  $\Delta y_l$  e  $\Delta z_l$ . A razão de refinamento  $r$  entre o espaçamento de dois níveis de refinamento consecutivos é constante, de maneira que

$$\Delta x_{l+1} = \frac{\Delta x_l}{r}, \quad \Delta y_{l+1} = \frac{\Delta y_l}{r}, \quad \Delta z_{l+1} = \frac{\Delta z_l}{r}.$$

Uma malha bloco-estruturada deve atender algumas restrições, entre elas a de que cada dois



blocos distintos de um mesmo nível são disjuntos, ou seja, dados dois blocos distintos de um nível  $l$ ,  $G_{l,i}$  e  $G_{l,j}$ , tem-se que  $G_{l,i} \cap G_{l,j} = \emptyset$  (exceto nas faces). Assim, define-se para cada nível de refinamento  $l$ , a malha do nível  $l$  por

$$G_l = \bigcup_{k=1}^{n_l} G_{l,k},$$

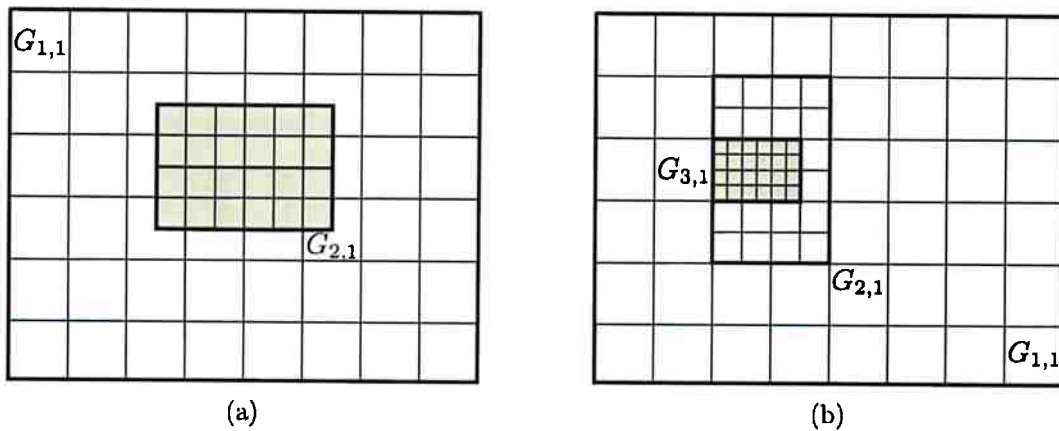
na qual  $n_l$  é o número de blocos do nível  $l$ . A partir desse ponto uma malha do nível  $l$  é um conjunto de blocos discretizados no nível de refinamento  $l$ . Uma malha bloco-estruturada é a união das malhas de todos os níveis

$$G = \bigcup_l G_l.$$

Outra restrição é que os blocos em níveis diferentes adjacentes precisam estar “propriamente aninhados”, ou seja,

1. um bloco em um nível fino deve começar e terminar no canto de uma célula computacional do próximo nível mais grosso; e
2. para cada canto de um bloco do nível fino, deve existir pelo menos uma célula computacional do próximo nível mais grosso em todas as direções (à direita, à esquerda, para frente, para trás, para cima e para baixo) que separa este bloco do nível fino de uma célula computacional do segundo próximo nível mais grosso (a menos que este bloco toque a fronteira do domínio computacional).

As Figuras 3.3-(a) e 3.3-(b) são exemplos, em duas dimensões, com dois e três blocos em níveis diferentes que não estão propriamente aninhados. A primeira restrição é violada na Figura 3.3-(a) e a segunda, é violada na Figura 3.3-(b). A figura 3.4 mostra três blocos em níveis diferentes propriamente aninhados. Note que é permitido um bloco de um nível interceptar dois blocos do nível sucessivamente mais grosso. As malhas são refinadas no espaço com razão de refinamento



**Figura 3.3:** Malhas não propriamente aninhadas: (a) canto incompatível, primeira restrição violada e (b) fronteira do bloco incompatível, segunda restrição violada.

$r = 2$ . Uma importante diferença do trabalho original de Berger e Colella (1989) em relação ao presente trabalho, é que não há refinamento na tamanho do passo de integração,  $\Delta t$ . Isto significa que a solução numérica, em todos os níveis de refinamento, é determinada com o mesmo tamanho de passo de integração  $\Delta t$  dado pelo espaçamento da malha mais fina. Note que isso não significa que o tamanho do passo  $\Delta t$  seja constante, veja Seção 3.5.3. Com isso, garante-se que o erro da discretização espacial e temporal tenham a mesma ordem de aproximação.

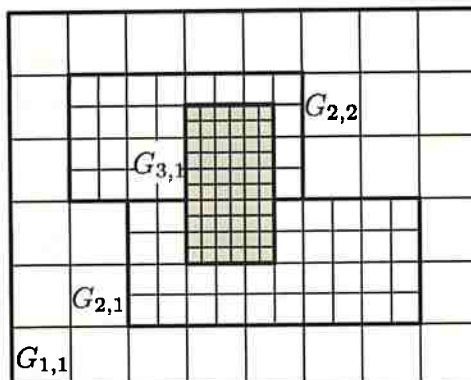


Figura 3.4: Malha propriamente aninhada.

### 3.2.2 Células fantasmas

Para permitir a comunicação de informação entre os diferentes retalhos da malha (e entre seus diferentes níveis de refinamento) e evitar que o estêncil da discretização de diferenças finitas próximo às interfaces de nível seja “formalmente diferente”, defini-se ao redor de cada um dos retalhos de malha uma região de “células fantasmas”. Os valores das variáveis nas células fantasmas são calculados por meio de interpolações polinomiais e fornecem uma aproximação do valor das variáveis naquela posição, definindo assim “condições de contorno”, em cada retalho. A Figura 3.5-(a) mostra uma malha, bidimensional, com dois níveis: o “nível de base” recobrendo todo o domínio computacional e mais um nível de refinamento. O segundo nível é composto por três retalhos de malha,  $G_{2,1}$ ,  $G_{2,2}$  e  $G_{2,3}$  (de acordo com a notação descrita na Seção 3.2.1). Tal figura mostra os tipos de aproximações que podem acontecer para se obter os valores armazenados nas células fantasmas, ilustradas no bloco  $G_{2,2}$ . A obtenção de valores nas células fantasmas definidas ao redor de

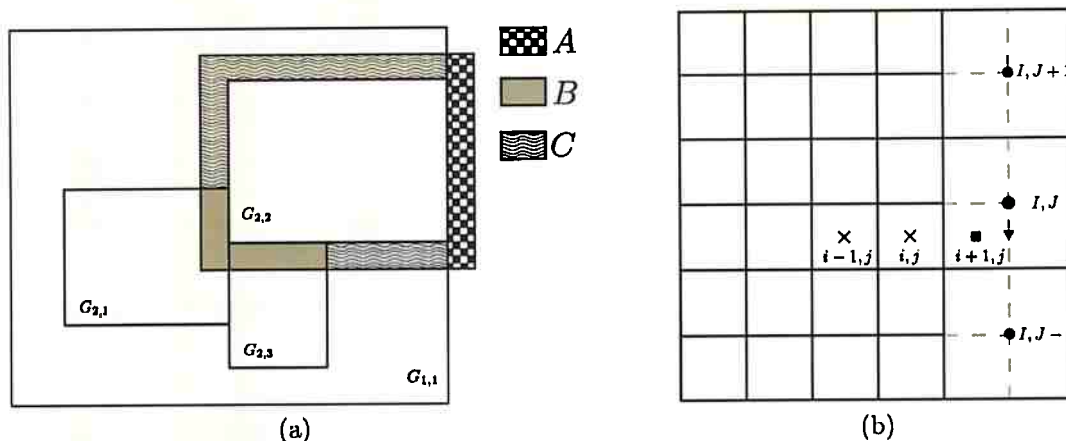


Figura 3.5: (a) Tipos de aproximações para as células fantasmas do bloco  $G_{2,2}$ : condição de contorno do domínio (A), malhas irmãs (retalhos no mesmo nível) (B) e interpolação fina-grossa de ordem 2 (C). (b) Estêncil da interpolação fina-grossa na célula  $(i+1, j)$ .

cada retalho de cada nível de refinamento depende de interpolações que envolvem valores em células computacionais pertencentes a níveis de refinamento diferentes. Os pesos destas interpolações dependem da localização das variáveis nas células computacionais e da ordem que se deseja para a aproximação. Por sua vez, tal ordem de aproximação está ligada à discretização dos operadores diferenciais. A aproximação dos valores de células fantasmas em regiões com interface fina-grossa usa tipicamente interpolação com polinômios quadráticos (Roma *et al.*, 1999; Roma, 1996). A seguir

o conjunto de equações

$$\begin{aligned}\varphi_{\nabla} &= \frac{5}{32}\varphi_{IJ-1} + \frac{15}{16}\varphi_{IJ} - \frac{3}{32}\varphi_{IJ+1}, \\ \varphi_{i+1j} &= \frac{-1}{5}\varphi_{i-1j} + \frac{2}{3}\varphi_{ij} + \frac{8}{15}\varphi_{\nabla}, \\ \varphi_{i+1j} &= \frac{-1}{5}\varphi_{i-1j} + \frac{2}{3}\varphi_{ij} + \frac{8}{15}\left(\frac{5}{32}\varphi_{IJ-1} + \frac{15}{16}\varphi_{IJ} - \frac{3}{32}\varphi_{IJ+1}\right), \\ \varphi_{i+1j} &= \frac{-1}{5}\varphi_{i-1j} + \frac{2}{3}\varphi_{ij} + \frac{1}{12}\varphi_{IJ-1} + \frac{1}{2}\varphi_{IJ} - \frac{1}{20}\varphi_{IJ+1},\end{aligned}$$

exemplifica uma interpolação fina-grossa, cujo estêncil é mostrado na Figura 3.5-(b).

As aproximações adotadas para os valores de uma variável numa célula, de uma malha composta, quando recobertas por uma malha mais fina, ou na condição de célula fantasma são as seguintes:

1. Em células recobertas, os valores são definidos como a média aritmética dos valores finos, no nível de refinamento acima, que a recobrem;
2. Extrapolação-interpolação cúbica de valores no contorno de cada retalho de um dado nível para as células recobertas do nível mais grosso abaixo;
3. Interpolação fina-grossa;
4. Preenchimento de valores em células fantasmas sobrepostas por “malhas irmãs”, isto é, injeção de valores diretamente de retalhos de mesmo nível, vizinhos;
5. Condição de contorno no bordo do domínio computacional.

As aproximações 1 e 2 definem de maneira apropriada os valores nas “células recobertas” (células computacionais que compartilham a mesma região do domínio e estão em níveis de refinamento diferentes). Enquanto as aproximações 3 até o passo 5, definem os valores de todas as células fantasmas, como ilustrado na Figura 3.5-(b). Para mais detalhes veja [Minion \(1996\)](#) e [Roma et al. \(1999\)](#).

### 3.2.3 Discretização dos operadores diferenciais na malha composta

Como a Seção 3.2 ressalta, uma grande vantagem da malha composta, utilizada no presente trabalho, é que uma discretização originalmente definida em uma malha cartesiana uniforme pode ser facilmente reutilizada. A discretização no espaço dos operadores diferenciais, fornecida na Seção 3.1 para malhas uniformes são aqui suplementadas para uma malha composta. A discretização dos operadores em malha composta é dada por:

- Gradiente: após a atualização dos valores das células fantasmas, o gradiente é aproximado em cada bloco (retalho) de cada nível por (3.1);
- Divergente: em cada retalho de cada nível o divergente é aproximado com a discretização (3.2);
- Produto interno:

$$\langle \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \rangle = \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \sum_{k=1}^{n_z} \varphi_{1,ijk} \varphi_{2,ijk} \varphi_{3,ijk} w_{ijk} \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3,$$

onde  $w_{ijk}$  é 0 se a célula  $(i, j, k)$  é recoberta e 1 em caso contrário.

Esta é uma operação que passa por todas as células de todos os níveis. Logo, para  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \in G_{l,m}$  com  $l = 1, \dots, l_{top}$  e  $m = 1, \dots, n_l$  temos

$$\langle \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \rangle_l = \sum_{l=1}^{l_{top}} \sum_{m=1}^{n_l} \langle \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \rangle.$$

### 3.3 Domínio lagrangiano

Como descrito anteriormente, as equações de Navier-Stokes que descrevem o escoamento são discretizadas em uma malha euleriana que recobre todo o domínio computacional. Entretanto, algumas equações como a força de tensão superficial e a equação de advecção-difusão de surfactante insolúvel agem apenas sobre a interface de separação, logo são discretizadas numa malha lagrangiana que recobre apenas a interface. Com esta abordagem, as duas malhas são tratadas separadamente e as informações que são comuns às duas discretizações são atualizadas a cada passo no tempo por meio da discretização das equações de interpolação (2.9) e espalhamento (2.11).

A interface de separação (2.6) (o domínio lagrangiano) é discretizada por um conjunto de triângulos euclidianos  $\{S_k\}_{k=1,2,\dots,N_s}$ , assumindo a existência das constantes positivas  $c$ ,  $C$ , e  $h$  para as quais  $ch^2 \leq A_k \leq Ch^2$ , na qual  $A_k$  denota a área de  $S_k$  e  $h$  o diâmetro máximo (Huang e Russell, 2011, p. 158) adquirido por um triângulo qualquer em todo instante do tempo. Tais “triangularizações regulares” são supostas aqui, compartilharão mesma topologia de triangularização durante todo o tempo, sendo que para qualquer instante  $t^n$ , os vértices de  $S_k$  estão situados nas trajetórias de movimento dos vértices de  $S_k$  na superfície triangularizada inicial,  $\mathbf{X}(X_k(\alpha, 0), Y_k(\alpha, 0), Z_k(\alpha, 0))$ . A Figura 3.6 mostra uma interface triangularizada.

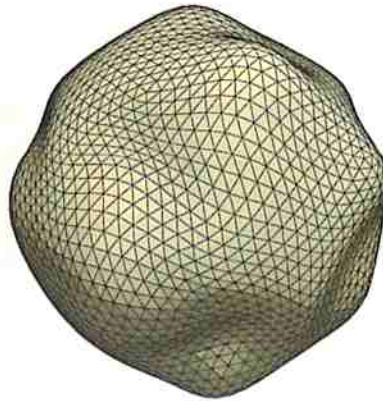
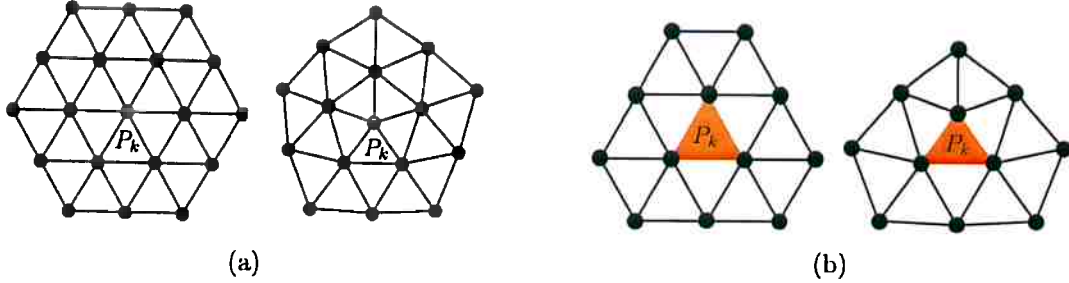


Figura 3.6: Interface triangularizada.

Na simulação de um escoamento bifásico a interface se movimenta de tal maneira que os pontos tendem a se aglomerar ou a se afastar entre si, de acordo com o escoamento ou a curvatura da interface, podendo degenerar a malha. Além disso, quando a evolução de surfactante é considerada os triângulos que discretizam a malha precisam ser acutângulos. Uma boa distribuição de pontos e triângulos acutângulos (quando existe a evolução de surfactante) são obtidos com um algoritmo de otimização de malha que desliza os vértices tangencialmente na direção do centro de massa de seus vértices vizinhos. A otimização de malha é descrita a seguir na Seção 3.3.2. Outro ajuste imposto à malha lagrangiana é a correção do volume da interface a cada passo no tempo, dado que em geral o método da fronteira imersa não conserva o volume (Peskin, 2002). A Seção 3.3.3 descreve a correção de volume da interface. O acoplamento discreto entre os domínios lagrangiano e euleriano por meio de espalhamento de força interfacial lagrangiana para a malha euleriana e a interpolação das velocidades da malha euleriana para a malha lagrangiana é descrito na Seção 3.5.4.

### 3.3.1 Operador de levantamento sobre a interface

O operador  $\widehat{\mathcal{P}}(\cdot)$  descrito a seguir para o “levantamento” de um ponto  $P_k$  para a interface ou para a interpolação de uma quantidade escalar definidos na interface de separação (2.6) é inspirado em (Renka, 1984). O sistema de coordenadas é transladado e rotacionado de tal maneira que a normal exterior unitária à superfície no ponto  $P_k$ ,  $\mathbf{n}_k$ , se torna paralela à  $\mathbf{v}_z = (0, 0, 1)$  no sistema local de coordenadas. A seguir, um conjunto de  $N$  pontos na vizinhança de  $P_k$  na interface,  $N = 19$  ou 16



**Figura 3.7:** Pontos na vizinhança de  $P_k$  utilizados na construção da função de interpolação: (a) possíveis configurações de estêncil quando  $P_k$  é um vértice, neste caso o número de pontos é igual a  $N = 19$  ou 16 (incluindo  $P_k$ ) e (b) quando  $P_k$  está no interior de um triângulo o número de pontos é  $N = 12$  ou 11.

se  $P_k$  é um vértice e  $N = 12$  ou 11 se  $P_k$  está no interior do triângulo como ilustrado na Figura 3.7,  $\{P_{k_i}\}_{i=1,\dots,N}$ , com coordenadas  $(x_{k_i}, y_{k_i})$  (no sistema local) são utilizados para construir uma função para aproximar qualquer quantidade escalar  $F$  definida nos pontos  $(x_{k_i}, y_{k_i})$ . Exemplos de funções locais de aproximação são  $F(x_{k_i}, y_{k_i}) = z_{k_i}$ , quando interpolamos a coordenada na direção  $z$  e  $F(x_{k_i}, y_{k_i}) = \Gamma_{k_i}$ , para interpolar a concentração de surfactante. O método escolhido, para compor a função interpoladora foi o método quadrático “modificado de Shepard”. No qual os pontos mais próximos do de interpolação tem um peso maior na construção do interpolador do que os mais distantes. Dado um ponto de interpolação  $p$ , um conjunto de pontos  $\{P_{k_i}\}_{i=1,\dots,N}$ , com seus valores dados por  $F(P_{k_i})_{i=1,\dots,N}$ , define-se uma função aproximadora

$$\tilde{f}(p) = \frac{\sum_{i=1}^N \Theta(d(p, P_{k_i})) Pol_{k_i}(p)}{\sum_{i=1}^N \Theta(d(p, P_{k_i}))},$$

na qual  $\Theta$  é dada por

$$\Theta(r) = \left[ \frac{(R-r)_+}{Rr} \right]^2,$$

com  $R > 0$  uma constante que define o raio máximo de vizinhança da função de base radial e  $(\cdot)_+$  é uma função que vale zero se a variável for negativa e o próprio valor se for positiva,  $d(\cdot, \cdot)$  é uma métrica de distância entre dois pontos,  $Pol_{k_i}(\cdot)$  é um polinômio em torno do ponto  $P_k$ , tal que  $Pol_{k_i}(P_{k_i}) = F(P_{k_i})_{i=1,\dots,N}$ . Uma boa descrição do método modificado Shepard pode ser encontrada em Renka (1988a,b) e mais recentemente em Thacker *et al.* (2010), no qual são descritas algumas variações do método.

Se o ponto  $P_k$  é um ponto interior ao triângulo da malha, calcula-se a normal exterior pelo produto vetorial de vetores paralelos às arestas do triângulo correspondente (a interface discreta é orientada). Caso  $P_k$  seja um vértice, a normal exterior,  $\mathbf{n}_k$ , é obtida por meio da soma vetorial das normais dos  $M$  triângulos vizinhos,  $\mathbf{n}_{k_j} \equiv \mathbf{n}_{v_k}$ , ( $M=5$  ou 6) ponderada pelas áreas de cada triângulo vizinho,  $AS_{k_j}$ , como descrito a seguir:

$$\mathbf{n}_{v_k} = \frac{\sum_{j=1}^M \mathbf{n}_{S_{k_j}} AS_{k_j}}{\sum_{j=1}^M AS_{k_j}}.$$

Na dedução da força de tensão superficial (Seção 3.6.2) e da equação de evolução de surfac-



tante (Seção 3.6.1), a interface de separação é assumida como a união de triângulos geodésicos (Reshetnyak, 1993, p. 47), chamados aqui de “triângulos curvos”, os quais compartilham dos mesmos vértices dos triângulos euclidianos  $S_k$  que discretizam a interface. Os triângulos curvos são considerados como a projeção (ou o “levantamento”) dos triângulos euclidianos sobre a interface. Como é ilustrado na Figura 3.8, na qual o operador de levantamento é aplicado a um triângulo  $S_k$  e a um ponto  $X_{S_k} \in S_k$ .

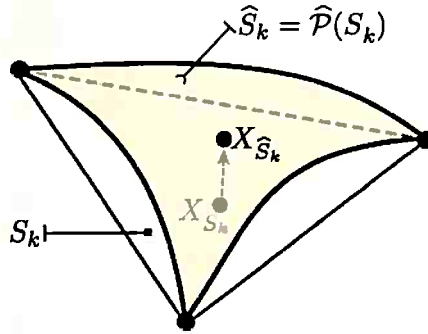


Figura 3.8: O triângulo “levantado” sobre a interface (o triângulo curvo),  $\hat{S}_k = \hat{\mathcal{P}}(S_k)$ , e a projeção sobre a interface de  $X_{S_k} \in S_k$ ,  $X_{\hat{S}_k} = \hat{\mathcal{P}}(X_{S_k})$ .

---

**Algorithm 1:** Operador de levantamento para a interface

---

**Entrada:**  $F(P_k)$

**Saída:**  $\hat{\mathcal{P}}(F(P_k))$

**início**

- 1) calcular  $\mathbf{n}_k$ , a normal exterior unitária à superfície passando por  $P_k$ ;
- 2) transladar e rotacionar o sistema de coordenadas de tal maneira que  $\mathbf{n}_k = (0, 0, 1)$ ;
- 3) utilizar um conjunto de pontos vizinhos à  $P_k$  sobre a interface para gerar uma função interpoladora;
- 4) interpolar;

**fim**

---

### 3.3.2 Otimização de malha

O esquema de volumes finitos empregado neste trabalho (Seção 3.6.1) assume que os pontos utilizados na discretização da concentração de surfactante são os circuncentros projetados nos triângulos curvos associados (veja Figuras 3.8 e 3.12-(b)). O cálculo apropriado dos fluxos nas fronteiras das células de volumes finitos dependem que para todo instante no tempo cada circuncentro esteja no interior de seu triângulo. Além disso, com a evolução do tempo os vértices dos triângulos tendem a se aglomerarem em determinadas regiões de acordo com o escoamento, com o gradiente de força superficial e curvatura da interface. Para evitar degeneração de malha e preservar o circuncentro no interior de seu triângulo, os vértices  $v_k$  são movimentados tangencialmente na direção do centróide (centro de massa) de seu “primeiro anel” (Figura 3.9), um procedimento similar ao utilizado por Botsch e Kobbelt (2004).

O primeiro passo desse procedimento é aplicado antes da advecção da interface. Consiste na interpolação da concentração de surfactante  $\Gamma_{\hat{S}_k}$  dos circuncentros projetados  $X_{\hat{S}_k} = \hat{\mathcal{P}}(X_{S_k})$  para os baricentros projetados  $B_{\hat{S}_k}^1 = \hat{\mathcal{P}}(B_{S_k}^1)$ . Simbolicamente, podemos escrever  $\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{\hat{S}_k})$ , na qual  $\hat{\mathcal{P}}(\cdot)$  (Seção 3.3.1) é o operador de levantamento usado para projetar um ponto na interface, ou para interpolar a concentração de surfactante.



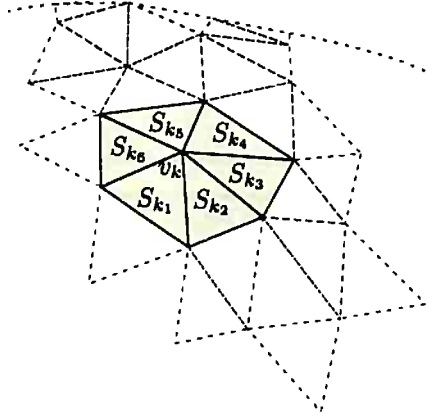


Figura 3.9: O primeiro anel do vértice  $v_k$ .

A seguir, o centroide do primeiro anel do vértice  $v_k$  é recalculado como

$$\tilde{v}_k = \frac{\sum_{j=1}^M B_{\hat{S}_k}^1 A_{S_{k_j}}}{\sum_{j=1}^M A_{S_{k_j}}}, \quad (3.5)$$

na qual  $A_{S_{k_j}}$  representa a área de um triângulo no primeiro anel.

Os centróides são projetados na interface,  $\hat{\mathcal{P}}(\tilde{v}_k)$ , se transformando num novo conjunto de vértices de uma “nova” interface discretizada. Por um momento, a interface é representada por duas malhas lagrangiana distintas. A concentração de surfactante, localizada nos baricentros projetados  $B_{\hat{S}_k}^1$ , é então interpolada para um novo conjunto de baricentros  $B_{\hat{S}_k}^2$  obtida por  $\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^2} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1})$ . A seguir, cada vértice  $v_k$  e baricentro projetado  $B_{\hat{S}_k}^1$  são atualizados

$$v_k \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\tilde{v}_k), \quad (3.6)$$

$$B_{\hat{S}_k}^1 \leftarrow B_{\hat{S}_k}^2. \quad (3.7)$$

O procedimento é repetido enquanto existir algum triângulo obtusângulo (Figura 3.10). Quando o objetivo é atingido a concentração de surfactante é interpolada novamente para os circuncentros projetados,  $\Gamma_{\hat{S}_k} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1})$ . A Figura 3.10 mostra um exemplo de interface antes (esquerda) e depois (direita) da otimização de malha como uma função do ângulo máximo de cada triângulo.

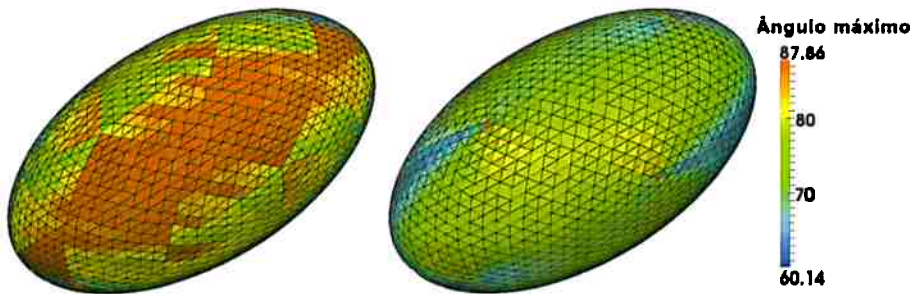


Figura 3.10: Superfície discretizada original (esquerda) e com otimização de malha (direita).

**Algorithm 2:** Otimização de malha

**Entrada:**  $v_k^n, \Gamma_{\hat{S}_k}, X_{\hat{S}_k} = \hat{\mathcal{P}}(X_{S_k}), B_{\hat{S}_k}^1 = \hat{\mathcal{P}}(B_{S_k}^1)$

**Saída:** posição otimizada para  $v_k^n$

**início**

interpolarm a concentração de surfactante em  $X_{\hat{S}_k}$  para  $B_{\hat{S}_k}^1$ :  $\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{\hat{S}_k})$ ;

**if** *existe um triângulo obtusângulo* **then**

**repita**

    1) calcular o centroide do primeiro anel:  $\tilde{v}_k = \frac{\sum_{j=1}^M B_{\hat{S}_{k_j}}^1 A_{S_{k_j}}}{\sum_{j=1}^M A_{S_{k_j}}}$ ;

    2) projetar os centróides na interface:  $\hat{\mathcal{P}}(\tilde{v}_k)$ ;

    3) interpolarm a concentração de surfactante em  $B_{\hat{S}_k}^1$  para  $B_{\hat{S}_k}^2$ :  $\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^2} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1})$ ;

    4) atualizar os vértices:  $v_k \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\tilde{v}_k)$ ;

    5) atualizar os baricentros:  $B_{\hat{S}_k}^1 \leftarrow B_{\hat{S}_k}^2$ ;

**até** *que todos os triângulo sejam acutângulos* ;

$\Gamma_{\hat{S}_k} \leftarrow \hat{\mathcal{P}}(\Gamma_{B_{\hat{S}_k}^1})$ ;

**else**

  sair;

**fim**

**3.3.3 Correção de volume da interface imersa**

A metodologia utilizada para advecção da interface (o método da fronteira imersa) em geral não conserva o volume (Peskin, 2002). Embora para todos os casos simulados a mudança de volume observada foi muito pequena (em torno de  $10^{-4}\%$  por passo no tempo), a mesma tem um efeito cumulativo. Um “passo de correção” simples, baseado na expansão ou compressão uniforme da interface por uma quantidade  $\epsilon$  na direção normal, ajuda evitar o ganho ou a perda de volume no tempo. Uma aproximação para  $\epsilon$  é dada por

$$\epsilon = \left( \frac{\mathcal{V}^n}{\mathcal{A}_S^n} \right) \left( 1 - \frac{\mathcal{V}^0}{\mathcal{V}^n} \right), \quad (3.8)$$

na qual  $\mathcal{V}^n$ ,  $\mathcal{A}_S^n$  e  $\mathcal{V}^0$  são aproximações do volume limitado pela interface (2.6) no tempo  $n$ , a área discreta superficial da interface e o volume discreto inicial da interface, respectivamente. Cada vértice  $v_k^n$  é movimentado na direção normal na direção oposta da alteração de volume  $v_k^n \leftarrow v_k^n - \epsilon \mathbf{n}_{v_k^n}$ .

**Algorithm 3:** Correção de volume da interface

**Entrada:**  $v_k^n, \mathcal{V}^n, \mathcal{V}^0, \mathcal{A}_S^n, \mathbf{n}_{v_k^n}$ , tolerância

**Saída:** nova posição de  $v_k^n$

**início**

**repita**

    1) calcular  $\epsilon = \left( \frac{\mathcal{V}^n}{\mathcal{A}_S^n} \right) \left( 1 - \frac{\mathcal{V}^0}{\mathcal{V}^n} \right)$ ;

    2) atualizar a posição de todos os vértices  $v_k^n \leftarrow v_k^n - \epsilon \mathbf{n}_{v_k^n}$ ;

**até**  $(\mathcal{V}^n - \mathcal{V}^0 < \text{tolerância})$  ou *(atingir número máximo de iterações)* ;

**fim**

### 3.4 Função indicadora de fluido

Determinar corretamente cada uma das propriedades físicas das diferentes fases envolvidas em um escoamento multifásico é um problema importante na área de simulação numérica. Os métodos numéricos para calcular o escoamento de fluidos multifásicos, podem ser divididos em duas classes principais: métodos de captura de interfaces (*front-capturing methods*) e métodos de acompanhamento de interfaces (*front-tracking methods*). Nos métodos de captura de interfaces, tais como o método *level set* (Osher e Fedkiw, 2001; Shin *et al.*, 2005) e o de volume de fluido VoF (Popinet e Zaleski, 1999), a interface do fluido está definida implicitamente por meio de uma função escalar (e.g. uma função distância ou uma fração de volume) que atua como uma função indicadora de fluido. Estes métodos capturam o movimento da interface sobre uma malha euleriana e refletem automaticamente as mudanças na topologia da interface. Por outro lado, os métodos de acompanhamento de interface (Ceniceros e Roma, 2005; Pau *et al.*, 2012; Peskin, 1977; Tryggvason *et al.*, 2001; Unverdi e Tryggvason, 1992) usam uma malha separada para seguir explicitamente o movimento da interface e assim obtêm, em geral, uma representação exata das quantidades geométricas da interface.

No presente trabalho, o controle das propriedades de cada material ou fluido é feito por meio de uma função indicadora de fluidos  $\phi$  (Ceniceros e Roma, 2005). Esta função indicadora satisfaz a propriedade de ser positiva na fase contínua e negativa na fase dispersa, como mencionado na Seção 2.1.

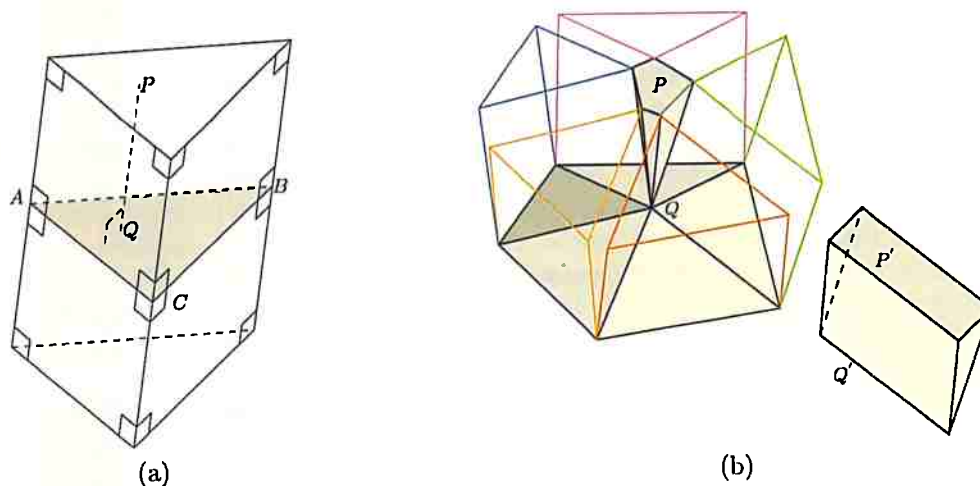
Há diferentes técnicas para definir uma função que identifique as fases contínua e dispersa, sendo uma das mais conhecidas dada pela solução de uma equação de Poisson para  $\phi$  (Shin *et al.*, 2005; Unverdi e Tryggvason, 1992). Uma outra proposta robusta e que garante precisão para as regiões com elevadas curvaturas para definir uma função indicadora de forma eficiente foi proposta por Ceniceros e Roma (2005). Esta abordagem emprega ideias de geometria computacional para a construção da função indicadora e tem baixo custo computacional uma vez que não existe a necessidade de resolver sistemas lineares.

Para determinar a função indicadora ao longo do tempo, é usado um algoritmo *Closest Point Transform* (CPT) (Mauch, 2000). O algoritmo determina a menor distância euclidiana dos pontos da malha euleriana em relação à interface  $S$ . Por motivo de eficiência, depois de iniciar a função indicadora de fluidos em todos os pontos da malha euleriana no primeiro passo no tempo, somente informações locais são usadas na atualização da função indicadora ao término de cada passo no tempo, após os pontos lagrangianos (vértices da superfície de separação) terem se movido. Apenas os pontos eulerianos pertencentes à uma vizinhança de tamanho  $\epsilon$  da superfície têm a função indicadora atualizada em cada instante do tempo. Dado  $\gamma$ , tal que  $0 < \gamma < \epsilon$ , a função indicadora é definida com valores variando entre  $-\gamma$  e  $\gamma$ . Fora de uma vizinhança de tamanho  $\gamma$  da superfície, se o ponto é exterior à superfície o valor da função indicadora é  $-\gamma$ . Mais precisamente, dada uma triangularização que representa a superfície  $S$ , define-se a função indicadora de fluidos em uma faixa estreita centrada em  $S$  com largura  $2\gamma > 0$ . Fora dessa faixa, a função indicadora  $\phi$  é continuamente definida igual a  $\pm\gamma$ . Assim,

$$\phi(P) = \begin{cases} -\gamma & \text{se } d(P) < -\gamma, \\ d(P) & \text{se } |d(P)| \leq +\gamma, \\ +\gamma & \text{se } d(P) > +\gamma, \end{cases} \quad (3.9)$$

na qual  $d(P)$  é a distância euclidiana com sinal do ponto  $P$  até a superfície  $S$ .

Como a superfície triangularizada é composta por faces, arestas e vértices, dado um ponto  $P$  pertencente a malha euleriana, o ponto  $Q \in S$  que minimiza a distância euclidiana entre  $P$  e  $S$  está em uma face, em uma aresta ou em um vértice de  $S$ . Dado um ponto  $P$  da malha euleriana, se o ponto  $Q$  que minimiza a distância de  $P$  à superfície  $S$  estiver em uma das faces de  $S$  então o vetor  $(P-Q)$  é ortogonal a esta face. Assim,  $P$  pertence a um prisma reto de base triangular, determinado pelo vetor normal à face e pelos vértices do triângulo da face  $A$ ,  $B$  e  $C$  representados na Figura 3.11-(a). Esse prisma de base triangular contém pontos da malha euleriana que podem estar na região



**Figura 3.11:** Dado um ponto  $P$  ( $P'$ ) pertencente a malha euleriana, o ponto  $Q$  ( $Q'$ )  $\in S$  que minimiza a distância euclidiana entre  $P$  ( $P'$ ) e  $S$  pode estar localizado numa face, em uma aresta ou em um vértice. (a) Prisma reto de base triangular no qual  $P$  está contido, enquanto  $Q$  está localizado na face. (b) Canaletas sobre a superfície triangularizada na qual  $P'$ ,  $P$  estão contidos nas canaletas e  $Q'$ ,  $Q$  estão localizados na aresta e no vértice respectivamente.

externa ou na região interna à superfície  $S$ . Nas arestas e vértices, a superfície triangularizada não tem um vetor normal definido. Neste caso, utiliza-se os vetores normais às faces adjacentes à aresta ou ao vértice para construir uma “canaleta” que contém todos os pontos da malha euleriana cujo ponto de distância mínima esteja sobre esta aresta ou vértice, a Figura 3.11-(b) mostra um exemplo de canaleta em uma das regiões limitadas pela interface para um vértice e para uma aresta.

A primeira implementação da função indicadora tridimensional no grupo de desenvolvimento deste trabalho foi realizada por Azeredo (2007), a seguir por Thiago Pinheiro de Macedo que implementou a mesma em seu trabalho de conclusão de curso. Essa última implementação foi acoplada junto ao trabalho de Nós (2007) por Pivello *et al.* (2014) e deu origem ao algoritmo da função indicadora utilizada no presente trabalho.

A função indicadora de fluido em conjunto com a Função de Heaviside é utilizada na atualização das propriedades, como descrito na Seção 2.1.

### 3.5 Escoamento bifásico incompressível transiente

A presente seção descreve a metodologia numérica para a solução de um escoamento incompressível bifásico transiente, modelado pelas equações de Navier-Stokes e continuidade (2.7)-(2.10). Tais equações são discretizadas em uma malha euleriana (Seções 3.1 e 3.2) por um método de projeção inspirado no método de Chorin (1968) e Témam (1969), descrito na Seção 3.5.1. No tempo, são resolvidas por uma metodologia semi-implícita baseada nos métodos implícitos-explícitos (IMEX) (Ascher *et al.*, 1995; Wang e Ruuth, 2008), descritos na Seção 3.5.2, os quais evitam restrições temporais severas oriundas do termo difusivo, tal como é feito em Cenicerós *et al.* (2010b).

O modelo matemático bifásico e a seleção das fases é feita com o uso da função indicadora de fluidos, descrita na Seção 3.4 e da Função de Heaviside (2.3). Enquanto que a função delta de Dirac (Seção 3.5.4) é responsável pelo acoplamento dos domínios euleriano e lagrangiano por meio das operações discretas de espalhamento (2.11) e interpolação (2.9), intrínsecas ao método da fronteira imersa, aqui utilizado. E a modelagem de um escoamento bifásico incompressível transiente é concluída com a Seção 3.5.5 descrevendo o método de dois passos com espaçamento variável utilizado na movimentação da interface.

### 3.5.1 Método da projeção de Chorin-Temam

O objetivo do método da projeção consiste em desacoplar, na equação da conservação da quantidade de movimento (2.7), o cálculo da velocidade do da pressão. O método da projeção é um método do tipo “passo fracionado” (Ferziger e Perić, 1999), já que obtém um campo de velocidade auxiliar e com este se corrige a pressão (Bell *et al.*, 1989; Chorin, 1968; Kim e Moin, 1985; Roma *et al.*, 1999).

No método da projeção de Chorin-Temam para escoamentos incompressíveis, a velocidade e a pressão são determinadas em dois passos. No primeiro, um campo de velocidades auxiliar  $\mathbf{u}^*$  é calculado com a equação (2.7) da conservação da quantidade de movimento, desprezando a condição de incompressibilidade dada na equação (2.10). No segundo passo, o campo de velocidade auxiliar  $\mathbf{u}^*$  é projetado no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo para calcular a correção da pressão. A partir dela a pressão e o campo de velocidade  $\mathbf{u}$  são corrigidos, satisfazendo a condição de incompressibilidade. O método da projeção tem como base o teorema da decomposição de Helmholtz-Hodge (Chorin e Marsden, 1992), cujo enunciado é apresentado a seguir.

**Teorema 3.5.1.** *Seja  $\Omega$  uma região no espaço (ou no plano) com fronteira  $\partial\Omega$  suave. Um campo vetorial  $\mathbf{w}$  em  $\Omega$  pode ser decomposto de maneira única como*

$$\mathbf{w} = \mathbf{u}_d + \nabla\phi, \quad (3.10)$$

onde  $\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0$ ,  $\phi$  é uma propriedade escalar e  $\mathbf{u}_d$  é paralelo a  $\partial\Omega$ , isto é,  $\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n} = 0$  e  $\mathbf{n}$  é o vetor normal a  $\mathbf{u}_d$ .

A decomposição descrita na expressão (3.10) pode ser vista como a projeção do campo vetorial no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo. Em resumo, a solução das equações de Navier-Stokes pelo método da projeção é obtida pela execução dos seguinte passos:

**Passo 1.** Calcular o campo de velocidade auxiliar  $\mathbf{u}^*$ ;

**Passo 2.** Projetar o campo de velocidade auxiliar  $\mathbf{u}^*$  com  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  e determinar a correção da pressão  $q$ ;

**Passo 3.** Corrigir o campo de velocidade  $\mathbf{u}$  usando a nova correção da pressão  $q$ ;

**Passo 4.** Corrigir a pressão  $p$ .

O campo de velocidade auxiliar  $\mathbf{u}^*$  é solucionado com um esquema IMEX definido a seguir.

### 3.5.2 Discretização no tempo: métodos implícitos-explícitos

Para uma equação da forma

$$u_t = g(u) + f(u), \quad (3.11)$$

onde  $g$  representa um termo difusivo e  $f$  um termo advectivo, Ascher *et al.* (1995) propõem uma discretização com esquemas temporais implícitos-explícitos (IMEX). Tais métodos tratam explicitamente o termo advectivo e implicitamente o termo difusivo. O tratamento explícito do termo advectivo evita a resolução de um sistema não linear e o tratamento implícito do termo difusivo evita a escolha de um tamanho restritivo para o passo de tempo  $\Delta t$ .

Os métodos IMEX são obtidos por meio de expansões em séries de Taylor da equação (3.11) as quais, dependendo da ordem desejada para o método, determinam o valor de constantes apropriadas para a discretização. Inicialmente, as discretizações que podiam ser usadas com os métodos IMEX precisavam que o passo de tempo  $\Delta t$  fosse constante em cada passo temporal. Esta restrição foi derrubada por Wang e Ruuth (2008), que apresentaram uma forma geral de um método IMEX de  $s$  passos, com um tamanho de passo  $\Delta t$  variável. Os métodos de  $s$  passos possuem ordem de aproximação  $s$ .



No presente trabalho, os esquemas IMEX de dois passos que aceitam o uso de  $\Delta t$  variável ou constante são apresentados.

Três instantes de tempo são considerados  $t^{n-1}$ ,  $t^n$  e  $t^{n+1}$ , de forma que o tamanho do passo do tempo seja  $\Delta t_n = t^n - t^{n-1}$  e  $\Delta t_{n+1} = t^{n+1} - t^n$ . A forma geral de uma aproximação para a equação (3.11) com o uso de esquemas IMEX de dois passos e ordem dois, e com tamanho de passo de integração variável, é dada pela expressão (Wang e Ruuth, 2008)

$$\frac{\alpha_2 u^{n+1} + \alpha_1 u^n + \alpha_0 u^{n-1}}{\Delta t_{n+1}} = \theta_2 g^{n+1} + \theta_1 g^n + \theta_0 g^{n-1} + \beta_1 f^n + \beta_0 f^{n-1}, \quad (3.12)$$

na qual  $u^k$ ,  $f^k$  e  $g^k$  são uma aproximação para  $u(t^k)$ ,  $f(u^k)$  e  $g(u^k)$  respectivamente, sendo  $k = n-1, n, n+1$ , e  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  e  $\theta_i$  parâmetros que dependem de  $\Delta t_{n+1}$  e  $\Delta t_n$ , com  $\alpha_2 \neq 0$  e  $\theta_2 \neq 0$ . Os parâmetros  $\alpha_i$ ,  $\theta_i$  e  $\beta_i$  são dados por:

$$\alpha_2 = \frac{\Delta t_n + 2\gamma\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n + \Delta t_{n+1}}, \alpha_1 = \frac{(1-2\gamma)\Delta t_{n+1} - \Delta t_n}{\Delta t_n}, \alpha_0 = \frac{(2\gamma-1)\Delta t_{n+1}^2}{\Delta t_n(\Delta t_n + \Delta t_{n+1})}; \quad (3.13)$$

$$\theta_2 = \gamma + \frac{\Delta t_n c}{2\Delta t_{n+1}}, \theta_1 = 1 - \frac{\Delta t_n c}{2\Delta t_{n+1}} - \frac{c}{2} - \gamma, \theta_0 = \frac{c}{2}; \quad (3.14)$$

$$\beta_1 = \frac{\gamma\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n} + 1, \beta_0 = -\frac{\gamma\Delta t_{n+1}}{\Delta t_n}. \quad (3.15)$$

A forma paramétrica de (3.11) em função dos coeficientes  $\alpha_i$ ,  $\theta_i$  e  $\beta_i$  (3.13)-(3.15)

permite que, combinando-se  $\gamma$  e  $c$ , obtêm-se diferentes métodos de aproximação temporal. Pode-se escolher dentre os esquemas de dois passos os métodos de Cranck-Nicolson-Adams-Bashforth (CNAB), Cranck-Nicolson-Adams-Bashforth Modificado (MCNAB), Gear extrapolado e Cranck-Nicolson-*Leap-Frog* (CNLF). Os esquemas CNAB, MCNAB, Gear e CNLF são obtidos, respectivamente, ao se escolher o par de parâmetros  $(c, \gamma)$  da forma,  $(0, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{8}, \frac{1}{2})$ ,  $(0, 1)$  e  $(1, 0)$ .

Os esquemas temporais IMEX de dois passos precisam de um esquema temporal de um passo para aproximar o primeiro passo de integração. Para a aproximação no primeiro passo no tempo, usa-se o esquema IMEX Euler semi-implícito de um passo e de primeira ordem, dado pela expressão

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t_{n+1}} = g(u)^{n+1} + f(u)^n. \quad (3.16)$$

Uma estratégia semi-implícita para tratar a não linearidade do termo difusivo, para a solução da equação da conservação da quantidade de movimento (2.7), foi empregada quando a viscosidade  $\mu$  é variável. Esta estratégia pode ser encontrada em Ceniceros *et al.* (2010a); Douglas e Dupont (1971); Gottlieb e Orszag (1993) e consiste em somar e subtrair a (2.7) o termo viscoso  $\xi \nabla^2 \mathbf{u}$ . Empregando  $\xi = c_1 \|\eta(\phi)\|_\infty$ , com  $c_1 > 0$ , (2.7) pode ser reescrita como

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \xi \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p + \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{u}), \quad (3.17)$$

na qual

$$\tilde{\mathbf{f}} = \nabla \cdot [\eta(\phi)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \xi \nabla^2 \mathbf{u} - \rho(\phi)(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (3.18)$$

no presente trabalho  $c_1 = 2$ , uma constante *ad hoc* escolhida através de experimentação numérica e pela análise realizada por Xu e Tang (2006), sendo  $\phi$  a função indicadora de fluidos descrita na seção 2.1 e discretizada na seção 3.4.



### 3.5.3 Discretização no tempo para o modelo de escoamento bifásico

A discretização no tempo das equações de Navier-Stokes (2.7)- (2.10), para um escoamento incompressível bifásico, utiliza um esquema de passo temporal variável, implícito linear baseado num método dois passos de segunda ordem de Gear, no qual termos não lineares são extrapolados no tempo, descrito na Seção 3.5.2. Variáveis primitivas são utilizadas e o acoplamento pressão-velocidade é tratado com um método de projeção (Seção 3.5.1) e incremento de pressão (Ceniceros *et al.*, 2010a,b).

A discretização temporal da equação da conservação da quantidade de movimento (2.7), com o método IMEX de segunda ordem, é dada por

$$\rho^n \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t_{n+1}} = \theta_2 \mathbf{g}^{n+1} + \theta_1 \mathbf{g}^n + \theta_0 \mathbf{g}^{n-1} + \beta_1 \bar{\mathbf{f}}^n + \beta_0 \bar{\mathbf{f}}^{n-1}, \quad (3.19)$$

na qual  $\bar{\mathbf{f}}$  foi definido em (3.18) e

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}) = \xi \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p. \quad (3.20)$$

Para  $l = n - 1, n, n + 1$  e  $k = n - 1, n$ , o esquema semi-implícito é dado por

$$\mathbf{g}^l = -\mathbf{G}p^l + \xi \mathbf{L}\mathbf{u}^l \quad \text{e} \quad (3.21)$$

$$\bar{\mathbf{f}}^k = -\xi \mathbf{L}\mathbf{u}^k - \rho \left( \mathbf{u}^k \cdot \mathbf{G} \right) \mathbf{u}^k + \mathbf{D} \cdot \left[ \mu \left( \mathbf{G}\mathbf{u}^k + (\mathbf{G}\mathbf{u}^k)^T \right) \right] + \mathbf{f}^k. \quad (3.22)$$

Utilizando-se dessa discretização temporal, o acoplamento da pressão e da velocidade é tratado seguindo os passos descritos na Seção 3.5.1, como segue

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 \left( \frac{\xi \mathbf{L}\mathbf{u}^* - \mathbf{G}p^n}{\rho^n} \right) + \frac{\theta_1 \mathbf{g}^n + \theta_0 \mathbf{g}^{n-1}}{\rho^n} + \frac{\beta_1 \bar{\mathbf{f}}^n + \beta_0 \bar{\mathbf{f}}^{n-1}}{\rho^n}, \quad (3.23)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t^{n+1}}{\alpha_2} \mathbf{G}q, \quad (3.24)$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (3.25)$$

na qual  $\mathbf{u}^*$  é uma velocidade auxiliar determinada da equação (3.23) e  $q$  é a correção da pressão obtida de (3.23)-(3.24).

Para que a condição de incompressibilidade (3.25) seja satisfeita, de (3.24) desenvolve-se a equação elíptica para a correção da pressão

$$\mathbf{D} \cdot \left[ \frac{1}{\rho^n} \mathbf{G}q \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t^{n+1}} \mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^*, \quad (3.26)$$

onde o campo de velocidade  $\mathbf{u}^{n+1}$  e a pressão  $p^{n+1}$  corrigidos estão, respectivamente, dados por

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t^{n+1}}{\alpha_2} \frac{\mathbf{G}q}{\rho^n}, \quad (3.27)$$

$$p^{n+1} = p^n + q. \quad (3.28)$$

Uma observação importante sobre as condições de contorno numéricas para a velocidade e a pressão é que as fronteiras com condição de contorno de Dirichlet (Neumann) para a velocidade devem ter condição de contorno de Neumann (Dirichlet) para a pressão. Quando a condição de contorno para a velocidade é periódica em uma ou ambas as direções, a pressão também terá esta condição. A performance do método da projeção com condições de fronteira periódica pode ser apreciada no trabalho de Chorin (1969). As características do método de projeção no caso de condições de contorno Dirichlet (Neumann) são abordadas nos trabalhos de Bell *et al.* (1989); Brown *et al.* (2001); E e Liu (1995, 2002); Kim e Moin (1985); Van Kan (1986).

O passo no tempo apresenta restrições pelos efeitos da advecção, da difusão, pela capilaridade e pelo movimento da interface, dadas respectivamente por (Ceniceros *et al.*, 2010b; Tryggvason e Scardovelli, 2011, p. 54)

$$\nu_a = \frac{\|u_1\|_\infty}{\Delta x} + \frac{\|u_2\|_\infty}{\Delta y} + \frac{\|u_3\|_\infty}{\Delta z}, \quad \nu_d = 1/h, \quad \nu_c = \sqrt{\frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\pi\sigma_0}{h^3}}, \quad \nu_e = 1/h_e,$$

na qual  $(u_1, u_2, u_3) = \mathbf{u}$  é a velocidade do fluido,  $h = \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$  é o comprimento característico da malha euleriana, com  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  representando os espaçamentos da malha nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , sendo  $\rho_2$  a massa específica da fase contínua e  $\rho_1$  da gota,  $\sigma_0$  a tensão superficial da interface limpa e  $h_e$  o comprimento mínimo de aresta da malha lagrangiana, (triangularização não estruturada da interface). Dado as restrições acima, o passo no tempo é selecionado como

$$\Delta t = \min(c_a \nu_a^{-1}, c_c \nu_c^{-1}, c_d \nu_d^{-1}, c_e \nu_e^{-1}),$$

na qual  $0 < c_a \leq 1$ ,  $0 < c_c \leq 1$ ,  $0 < c_d \leq 1$ , and  $0 < c_e \leq 1$ .

Os sistemas formados pela equação (3.23) e pela equação de Poisson (3.26) são resolvidos por um método multigrid (multinível-*multigrid*) geométrico com ciclo-W e com relaxador Gauss-Seidel preto-vermelho implementados por Nós (2007) e Pivello (2012).

### 3.5.4 Acoplamento discreto entre os domínios lagrangiano e euleriano

O acoplamento discreto entre os domínios lagrangiano e euleriano ocorre pelos processos de espalhamento (2.11) e interpolação (2.9), definidos respectivamente como o espalhamento da densidade de força interfacial lagrangiana para a euleriana e pela interpolação do campo de velocidades da malha euleriana para a malha lagrangiana.

Uma função com papel de destaque na troca de informações entre as malhas euleriana e lagrangiana em especial no processo de espalhamento e de interpolação é a função delta de Dirac, a qual é aproximada por uma função distribuição que satisfaz algumas condições especiais (Peskin, 2002). A aproximação tridimensional é dada por

$$\delta_h^3(\mathbf{x} - \mathbf{X}) = \frac{1}{h_x h_y h_z} W\left(\frac{x - X}{h_x}\right) W\left(\frac{y - Y}{h_y}\right) W\left(\frac{z - Z}{h_z}\right), \quad (3.29)$$

na qual

$$W(r) = \begin{cases} 0.25 [1 + \cos(r\pi/2)], & |r| \leq 2, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

$(h_x, h_y, h_z)$  e  $(x, y, z)$  denotam o comprimento de malha cartesiana euleriana e as componentes de  $\mathbf{x}$ , respectivamente, enquanto  $X, Y, Z$  são as componentes lagrangiana correspondentes de  $\mathbf{X}$ .

Com o uso desta distribuição (função delta de Dirac discreta) os operadores discretos de espalhamento (2.11) e de interpolação (2.9), denotados respectivamente por  $\mathcal{S}_n$  e  $\mathcal{S}_n^*$  no instante  $t^n$  podem ser definidos por

$$(\mathcal{S}_n \mathcal{F})(\mathbf{x}^n) = \sum_{\alpha \in S_h} \mathcal{F}(\alpha) \delta_h^3(\mathbf{x}^n - \mathbf{X}(\alpha, t^n)) \Delta \alpha, \quad (3.30)$$

$$(\mathcal{S}_n^* \mathcal{U})(\alpha) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega_h} \mathcal{U}(\mathbf{x}^n) \delta_h^3(\mathbf{x}^n - \mathbf{X}(\alpha, t^n)) \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (3.31)$$

na qual  $S_h$  e  $\Omega_h$  representam os domínios discretos lagrangiano e euleriano, respectivamente, com  $\mathcal{F}(\cdot)$  uma função definida em  $S_h$  e  $\mathcal{U}(\cdot)$  definida em  $\Omega_h$ .

### 3.5.5 Discretização para a equação de movimento da interface

Realiza-se a advecção da interface seguindo uma descrição lagrangiana para cada um de seus vértices. O campo de velocidades calculado pelas equações de Navier-Stokes é interpolado para a interface (o domínio lagrangiano). A posição da interface, como descrita na equação (2.9), é então atualizada pela resolução de uma equação diferencial dada por

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\alpha, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(\alpha, t), \quad (3.32)$$

na qual  $\mathbf{X}(\alpha, t)$  é a posição da interface lagrangiana e  $\mathbf{U}(\alpha, t)$  é a velocidade da interface. No primeiro passo de integração a equação (3.32) é resolvida numericamente pelo método de Euler de primeira ordem, dado por:

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \Delta t^n \mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n). \quad (3.33)$$

Após resolver o primeiro passo de integração, um novo campo de velocidades é calculado. A partir deste momento, um método de Adams-Bashforth de dois passos com espaçamento variável de segunda ordem é utilizado,

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \Delta t^n \left(1 + \frac{\omega^n}{2}\right) \mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n) + \Delta t^n \left(-\frac{\omega^n}{2}\right) \mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1}), \quad (3.34)$$

na qual  $\Delta t^n = \omega^n \Delta t^{n-1}$ , dado que é possível armazenar e utilizar a velocidade e a posição da interface em pelo menos dois instantes do tempo. Note que o campo de velocidade  $\mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1})$  sempre pode ser obtido, mesmo após uma otimização ou remalhagem lagrangiana, pois nessa situação o campo pode ser restaurado por meio da interpolação de  $\mathbf{u}^{n-1}$  (velocidade na malha euleriana) na posição correspondente da interface (usando a interpolação (2.9) com a função delta de Dirac discreta (3.5.4)), outras informações podem ser obtidas no Apêndice E.

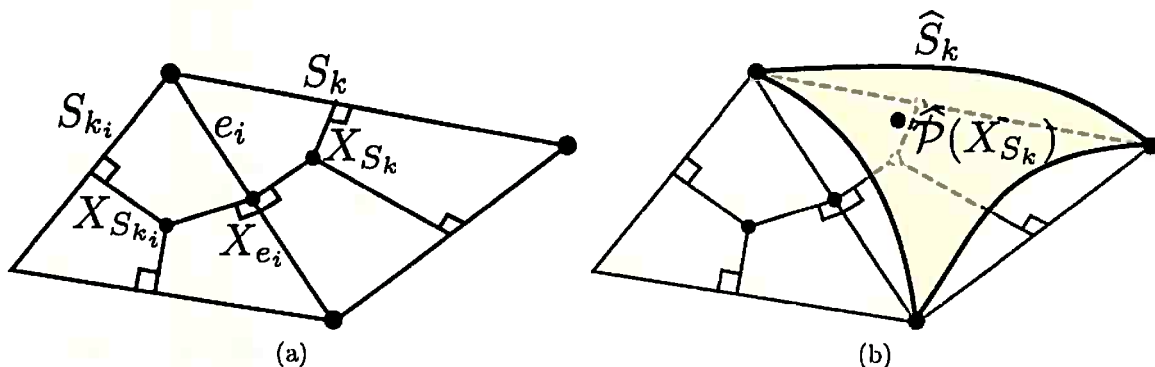
## 3.6 Discretização das forças externas atuantes no escoamento

A discretização das forças externas atuantes na equação de Navier-Stokes, consideradas neste trabalho, são apresentadas a seguir. O termo  $\mathbf{f}$  da equação 2.7 representa o somatório dessas forças, entre essas a força de tensão superficial e a força magnética, sendo essa última presente apenas quando uma das fases é um componente fluido magnético.

A Seção 3.6.1 apresenta a discretização por volumes finitos da equação de advecção-difusão da concentração de surfactante sobre a interface de separação. A Seção 3.6.2 apresenta a força de tensão superficial discretizada nos elementos triangulares do domínio lagrangiano. A seguir, a Seção 3.6.3 descreve a discretização da força magnética por operadores de segunda ordem na malha euleriana.

### 3.6.1 Discretização da equação de concentração de surfactante

Há situações nas quais a força de tensão superficial está sujeita à ação de surfactante insolúvel. Uma triangularização regular da interface é considerada, de tal maneira que cada triângulo  $S_k$  tem um ponto interior  $X_{S_k}$  e um ponto de aresta  $X_{e_i}$ , sendo  $e_i$  a  $i$ -ésima aresta  $S_k \cap S_{k_i}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , tal que o vetor  $X_{S_k} - X_{e_i}$  é perpendicular à aresta  $e_i$ . A triangularização é assumida de tal maneira que triângulos adjacentes  $S_k$  e  $S_{k_i}$  compartilham os mesmos pontos de arestas, como ilustrado na Figura 3.12-(a). Nesta configuração, [Lenz et al. \(2011\)](#) introduzem um esquema de volumes finitos para a equação (2.30) no qual a própria interface (e não o poliedro resultante da triangularização) é dividida em células de volumes finitos, “triângulos curvos”. Defini-se  $\hat{\mathcal{P}}(\cdot)$  (o operador de levantamento), descrito na Seção 3.3.1, como a projeção ortogonal na direção da normal à superfície, a Figura 3.12-(b) ilustra uma célula de volumes finitos, o triângulo curvo  $\hat{S}_k = \hat{\mathcal{P}}(S_k)$  obtido pela projeção ortogonal de  $S_k$  sobre  $S$  relativa à normal de  $S_k$ . Em particular, o ponto  $X_{\hat{S}_k} = \hat{\mathcal{P}}(X_{S_k}) \in \hat{S}_k$  é a projeção de  $X_{S_k}$ .



**Figura 3.12:** (a) Dois triângulos adjacentes  $S_k$  e  $S_{k_i}$ , e sua aresta comum  $e_i$ . (b) A célula de volumes finitos  $\hat{S}_k = \hat{P}(S_k)$  (o triângulo curvo) e a projeção sobre a interface de  $X_{S_k}$ ,  $X_{\hat{S}_k} = \hat{P}(X_{S_k})$ .

Lenz *et al.* (2011) estendem para volumes finitos ideias do método de elementos finitos de Dziuk e Elliott (2007). A ideia principal é usar a Fórmula de Leibniz (transporte) (Dziuk e Elliott, 2007) para as derivadas no tempo de quantidades integrais calculadas sobre uma superfície em movimento

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\hat{S}_k(t)} \left( \frac{D\Gamma}{Dt} + (\nabla_s \cdot \mathbf{U})\Gamma \right) d\hat{S}_k dt &= \int_{\hat{S}_k(t_{n+1})} \Gamma d\hat{S}_k - \int_{\hat{S}_k(t_n)} \Gamma d\hat{S}_k \\ &\approx A_k^{n+1} \Gamma(t_{n+1}, \hat{P}(X_{S_k}^{n+1})) - A_k^n \Gamma(t_n, \hat{P}(X_{S_k}^n)) \\ &= A_k^{n+1} \Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1} - A_k^n \Gamma_{\hat{S}_k}^n, \end{aligned} \quad (3.35)$$

na qual  $\Gamma_{\hat{S}_k}$  é a concentração de surfactante em  $X_{\hat{S}_k}$  num triângulo curvo sobre a superfície, cujo triângulo correspondente  $S_k$  tem área  $A_k$ . A principal consequência é que a curvatura média da superfície e a velocidade não aparecem explicitamente nas formulações. Da mesma forma que Lenz *et al.* (2011), integra-se o termo elíptico com relação ao tempo (dado a evolução de um triângulo curvo) e deduz-se, usando o Teorema de Gauss (Weatherburn, 1939), a seguinte aproximação:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\hat{S}_k(t)} \frac{1}{\zeta} \nabla_s \cdot (\nabla_s \Gamma) d\hat{S}_k dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\partial \hat{S}_k(t)} \frac{1}{\zeta} \nabla_s \Gamma \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial \hat{S}_k(t)} dl_k dt$$

na qual  $\boldsymbol{\eta}_{\partial \hat{S}_k}$  é a binormal exterior em  $\partial \hat{S}_k$ , ou seja, é tangente à interface e normal à  $\partial \hat{S}_k$ . Então a discretização relativa ao balanço contínuo

$$\int_{\hat{S}_k(t) \cap \hat{S}_{k_i}(t)} \left( \frac{1}{\zeta} \nabla_s \Gamma \right) |_{\hat{S}_k(t)} \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial \hat{S}_k(t)} dl_k = - \int_{\hat{S}_k(t) \cap \hat{S}_{k_i}(t)} \left( \frac{1}{\zeta} \nabla_s \Gamma \right) |_{\hat{S}_{k_i}(t)} \cdot \boldsymbol{\eta}_{\partial \hat{S}_{k_i}(t)} dl_k$$

em  $\hat{S}_k(t) \cap \hat{S}_{k_i}(t)$  para duas células adjacentes  $\hat{S}_k(t)$  e  $\hat{S}_{k_i}(t)$  é dado por

$$\frac{1}{\zeta} |_{e_i}^{n+1} \frac{\Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1} - \Gamma_{\hat{S}_k}^n}{d_{S_k|e_i}^{m+1}} = - \frac{1}{\zeta} |_{e_i}^{n+1} \frac{\Gamma_{\hat{S}_{k_i}}^{n+1} - \Gamma_{\hat{S}_{k_i}}^n}{d_{S_{k_i}|e_i}^{m+1}}, \quad (3.36)$$

na qual  $l_{e_i}$  é o comprimento da aresta  $e_i = S_k \cap S_{k_i}$ , com  $d_{S_k|e_i} = \|X_{S_k} - X_{e_i}\|$  e  $d_{S_{k_i}|e_i} = \|X_{S_{k_i}} - X_{e_i}\|$ , pela equação (3.36) determina-se que a concentração de surfactante em  $X_{e_i}$  é dada por

$$\Gamma_{e_i}^{n+1} = \frac{\Gamma_{\widehat{S}_k}^{n+1} d_{S_{k_i}|e_i}^n + \Gamma_{\widehat{S}_{k_i}}^{n+1} d_{S_k|e_i}^n}{d_{S_{k_i}|e_i}^n + d_{S_k|e_i}^n}. \quad (3.37)$$

Lenz *et al.* (2011) deduzem seu esquema baseado apenas na existência desses pontos possuindo tais propriedades geométricas especiais, não mencionando nenhuma seleção específica. No presente trabalho, considera-se natural que  $X_{S_k}$  sejam circuncentros e  $X_{e_i}$  pontos médios de aresta. Tais opções justificam-se pelo fato do segmento de linha conectando tais pontos ser sempre perpendicular à aresta correspondente. Nesse caso, a derivada normal nas arestas é aproximada com um operador de diferenças finitas de segunda ordem (Miura e Kimoto, 2005).

Partindo-se da aplicação da fórmula de Leibniz (3.35) com a discretização da equação elíptica (3.36) combinadas com a expressão (3.37) e escolhas acima citadas determina-se o esquema de volumes finitos

$$A_k^{n+1} \Gamma_{\widehat{S}_k}^{n+1} - A_k^n \Gamma_{\widehat{S}_k}^n = \frac{1}{\zeta} \Delta t \sum_{i=1}^3 l_{e_i}^{n+1} \left( \frac{\Gamma_{\widehat{S}_{k_i}}^{n+1} - \Gamma_{\widehat{S}_k}^{n+1}}{d_{S_k|S_{k_i}}^{n+1}} \right), \quad (3.38)$$

empregado nas células  $\{\widehat{S}_k\}_{k=1,2,\dots,N_s}$ , na qual  $\Delta t$  é o passo no tempo, com  $d_{S_k|S_{k_i}} = d_{S_k|e_i} + d_{S_{k_i}|e_i}$ . Aloca-se o sistema linear esparso (3.38) no formato *sparse triplet* e o mesmo é resolvido pelo método GMRES (*Generalized Minimal Residual Method*) (Erhel *et al.*, 1996), levando aproximadamente 12 iterações por passo no tempo para convergir. Note-se que não há restrição temporal no esquema de volumes finitos, dado que um Euler implícito é utilizado na discretização temporal.

O esquema de volumes finitos empregado conserva localmente a massa de surfactante (com precisão de máquina). Conservação é uma qualidade muito importante na preservação discreta da física do problema simulado, especialmente quando longos períodos de integração ou um grande número de passos de integração são necessários. Existem ocasiões quando, para manter o circuncentro no interior de seu triângulo, os vértices devem deslizar pequenas distâncias sobre a superfície para ajustar (otimizar) suas posições para este propósito. Essa “otimização de malha” é descrita na Seção 3.3.2, a qual não introduz nenhuma alteração topológica na malha lagrangiana, dado que preserva vértices e suas conectividades. A otimização da posição dos vértices envolve interpolações para obter aproximações da concentração de surfactante nas células de volumes finitos para as novas posições. Para minimizar a propagação de erro na massa total de surfactante  $\mathcal{M}^n$  no passo do tempo  $n$  provinda dessas interpolações, a conservação global é assegurada por um redimensionamento da massa de surfactante,  $\Gamma_{\widehat{S}_k}^n \leftarrow \Gamma_{\widehat{S}_k}^n \mathcal{M}^0 / \mathcal{M}^n$ , na qual  $\mathcal{M}^0$  é a quantidade inicial de massa de surfactante. Em implementações futuras, “remalhagem lagrangiana” serão utilizadas, na qual estão previstas mudanças na topologia da malha (e.g. troca de arestas, inserção e deleção de vértices).

### 3.6.2 Discretização da força interfacial

A força de tensão superficial total (2.12) agindo no  $k$ -ésimo triângulo pôde ser calculada como (Apêndice B)

$$\int_{\widehat{S}_k} \mathbf{F}_s d\widehat{S}_k = \int_{\widehat{S}_k} (\nabla_s \sigma - \kappa \sigma \mathbf{n}) d\widehat{S}_k = \oint_{\partial \widehat{S}_k} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} dl_k, \quad (3.39)$$

na qual  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{n}$  são respectivamente a tangente unitária e o vetor normal exterior à  $\widehat{S}_k$ , o triângulo curvo (veja a Figura 3.12-(b)). Para aproximar a integral de contorno em (3.39), um elemento triangular arbitrário  $S_k$  com seu triângulo curvo correspondente  $\widehat{S}_k$  são considerado, como descrito na Seção 3.6.1, cujas arestas são  $e_i = S_k \cap S_{k_i}$ , compartilhadas entre triângulos adjacentes  $S_{k_i}$ ,  $1 \leq i \leq 3$ . O cálculo discreto do coeficiente de tensão superficial, dado pela equação linear de

estado (2.14), para cada triângulo  $S_k$  é dado por

$$\sigma_k = \sigma_0(1 - \beta\Gamma_{\hat{S}_k}), \quad (3.40)$$

na qual  $\Gamma_{\hat{S}_k}$  é a concentração de surfactante no triângulo  $\hat{S}_k$  e  $\sigma_{e_i} = (1/2)(\sigma_k + \sigma_{k_i})$  é uma aproximação do coeficiente de tensão superficial na aresta  $e_i$ . Note-se que quando a interface é considerada limpa (sem a presença de surfactantes)  $\sigma_k = \sigma_0$ . Se  $V_a^i$  e  $V_b^i$  são as coordenadas cartesianas dos vértices determinando a aresta  $e_i$ , então defini-se

$$\mathbf{t}_i = \frac{V_b^i - V_a^i}{l_{e_i}}, \quad l_{e_i} = \|V_b^i - V_a^i\|, \quad (3.41)$$

$$\mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{n}_{S_k} + \mathbf{n}_{S_{k_i}}}{n_{e_i}}, \quad n_{e_i} = \|(\mathbf{n}_{S_k} + \mathbf{n}_{S_{k_i}})\|, \quad (3.42)$$

aproximações para a tangente unitária e para o vetor normal a  $e_{ki}$ ,  $1 \leq i \leq 3$ , na qual  $\mathbf{n}_{S_k}$  e  $\mathbf{n}_{S_{k_i}}$  são a normal unitária exterior à  $S_k$  e à  $S_{k_i}$ , respectivamente. Neste contexto, a força agindo sobre  $\hat{S}_k$  é aproximada por

$$\int_{\hat{S}_k} \mathbf{F}_s d\hat{S}_k = \oint_{\partial\hat{S}_k} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} dl_k \approx \sum_{i=1}^3 \sigma_{e_i} (\mathbf{t}_i \times \mathbf{n}_i) l_{e_i} \doteq \mathbf{f}_{S_k}, \quad (3.43)$$

Assim que a força é calculada em todos os triângulos ela é espalhada para a malha euleriana da maneira usual do método da fronteira imersa.

### 3.6.3 Discretização da força magnética

Determina-se a força força magnética (2.24) considerando-se o chamado comportamento superparamagnético, no qual a equação de Laplace (2.21) discretizada com os operadores divergente ( $\mathbf{D}$ ) e gradiente ( $\mathbf{G}$ ) definidos na Seção 3.1

$$\mathbf{D} \cdot [\mu \mathbf{G} \psi^{n+1}] = 0,$$

é resolvida com um método multinível multigrid para um potencial escalar magnético  $\psi$ , alocado no centro da célula computacional euleriana, com condição de fronteira de Neumann. A seguir, o potencial vetorial magnético é aproximado usando-se diferenças centradas de segunda ordem

$$\mathbf{H} = \nabla \psi = \begin{bmatrix} h_{xijk} \\ h_{yijk} \\ h_{zijk} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \frac{\psi_{i+1jk} - \psi_{i-1jk}}{2\Delta_x} \\ \frac{\psi_{ij+1k} - \psi_{ij-1k}}{2\Delta_y} \\ \frac{\psi_{ijk+1} - \psi_{ijk-1}}{2\Delta_z} \end{bmatrix}, \quad (3.44)$$

o qual é usado para computar o tensor magnético (2.22)

$$\begin{aligned} \sigma_m &= \mu \begin{bmatrix} h_x h_x & h_x h_y & h_x h_z \\ h_y h_x & h_y h_y & h_y h_z \\ h_z h_x & h_z h_y & h_z h_z \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \mu_0 (h_x^2 + h_y^2 + h_z^2) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sigma_{m_{xx}} & \sigma_{m_{xy}} & \sigma_{m_{xz}} \\ \sigma_{m_{yx}} & \sigma_{m_{yy}} & \sigma_{m_{yz}} \\ \sigma_{m_{zx}} & \sigma_{m_{zy}} & \sigma_{m_{zz}} \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \mu_0 (h_x^2 + h_y^2 + h_z^2) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

No presente trabalho, a localização do cálculo do campo magnético (centro da célula computacional), foi utilizada visando a generalização da estrutura computacional para o cálculo de outros tensores no futuro, como o viscoelástico por exemplo.



Nota-se que quando o divergente do tensor  $\sigma_m$  é calculado, o segundo termo,  $-(1/2)\mu_0\nabla(\mathbf{H}\cdot\mathbf{H})\mathbf{I}$  é proporcional ao divergente tensorial da matriz identidade e é absorvido no gradiente de pressão para todo o domínio. A seguir as seis componentes distintas deste tensor são calculadas a partir do potencial escalar magnético com operadores de segunda ordem

$$(\sigma_{m_{xx}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{i+1jk} - \psi_{i-1jk}}{2\Delta_x} \right)^2 \quad (3.46)$$

$$(\sigma_{m_{yy}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{ij+1k} - \psi_{ij-1k}}{2\Delta_y} \right)^2 \quad (3.47)$$

$$(\sigma_{m_{zz}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{ijk+1} - \psi_{ijk-1}}{2\Delta_z} \right)^2 \quad (3.48)$$

$$(\sigma_{m_{xy}})_{ijk} = (\sigma_{m_{yx}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{i+1jk} - \psi_{i-1jk}}{2\Delta_x} \right) \left( \frac{\psi_{ij+1k} - \psi_{ij-1k}}{2\Delta_y} \right) \quad (3.49)$$

$$(\sigma_{m_{xz}})_{ijk} = (\sigma_{m_{zx}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{i+1jk} - \psi_{i-1jk}}{2\Delta_x} \right) \left( \frac{\psi_{ijk+1} - \psi_{ijk-1}}{2\Delta_z} \right) \quad (3.50)$$

$$(\sigma_{m_{yz}})_{ijk} = (\sigma_{m_{zy}})_{ijk} = \mu \left( \frac{\psi_{ij+1k} - \psi_{ij-1k}}{2\Delta_y} \right) \left( \frac{\psi_{ijk+1} - \psi_{ijk-1}}{2\Delta_z} \right). \quad (3.51)$$

As componentes desse tensor são todas calculadas no centro das células computacionais. Entretanto como mencionado na Seção 3.1, neste trabalho, as componentes do campo de velocidade são alocadas numa malha deslocada, ou seja nas faces da célula computacional, o que implica que a força magnética deve ser calculada nas faces. Para tal precisa-se de aproximações das componentes desse tensor no meio das arestas da célula computacional, obtidas para face  $yz$  como a seguir

$$\begin{aligned} (\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j+1/2)(k)} &= \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{xy}})_{(i-1)(j)(k)}] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1)(j+1)(k)} + (\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j+1)(k)}] \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)} &= \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j-1)(k)}] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1)(j-1)(k)} + (\sigma_{m_{xy}})_{(i-1)(j)(k)}] \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{m_{xz}})_{(i-1/2)(j)(k+1/2)} &= \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xz}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{xz}})_{(i)(j)(k+1)}] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xz}})_{(i-1)(j)(k+1)} + (\sigma_{m_{xz}})_{(i-1)(j)(k)}] \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{m_{xz}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)} &= \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xz}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{xz}})_{(i)(j)(k-1)}] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{xz}})_{(i-1)(j)(k)} + (\sigma_{m_{xz}})_{(i-1)(j)(k-1)}], \end{aligned} \quad (3.55)$$

para a face  $xz$

$$(\sigma_{m_{yx}})_{(i+1/2)(j-1/2)(k)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yx}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{yx}})_{(i+1)(j)(k)}] + \quad (3.56)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yx}})_{(i+1)(j-1)(k)} + (\sigma_{m_{yx}})_{(i)(j-1)(k)}]$$

$$(\sigma_{m_{yx}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yx}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{yx}})_{(i-1)(j)(k)}] + \quad (3.57)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yx}})_{(i)(j-1)(k)} + (\sigma_{m_{yx}})_{(i)(j-1)(k)}]$$

$$(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k+1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j)(k+1)}] + \quad (3.58)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1)(k+1)} + (\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1)(k)}]$$

$$(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j)(k-1)}] + \quad (3.59)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1)(k)} + (\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1)(k-1)}],$$

e para a face  $xy$

$$(\sigma_{m_{zx}})_{(i+1/2)(j)(k-1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zx}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{zx}})_{(i)(j)(k-1)}] + \quad (3.60)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zx}})_{(i+1)(j)(k-1)} + (\sigma_{m_{zx}})_{(i+1)(j)(k)}]$$

$$(\sigma_{m_{zx}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zx}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{zx}})_{(i-1)(j)(k)}] + \quad (3.61)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zx}})_{(i-1)(j)(k-1)} + (\sigma_{m_{zx}})_{(i)(j)(k-1)}]$$

$$(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j+1/2)(k-1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j+1)(k)}] + \quad (3.62)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j+1)(k-1)} + (\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j)(k-1)}]$$

$$(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)} = \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j)(k)} + (\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j-1)(k)}] + \quad (3.63)$$

$$+ \frac{1}{4} [(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j)(k-1)} + (\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j-1)(k-1)}].$$

Então a força magnética (2.24) é calculada

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_m = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m &= \begin{bmatrix} \frac{\partial(\mu h_x h_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\mu h_x h_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\mu h_x h_z)}{\partial z} \\ \frac{\partial(\mu h_y h_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\mu h_y h_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\mu h_y h_z)}{\partial z} \\ \frac{\partial(\mu h_z h_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\mu h_z h_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\mu h_z h_z)}{\partial z} \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \mu_0 \begin{bmatrix} \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial x} \\ \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial y} \\ \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial z} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m)_{x_{ijk}} \\ (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m)_{y_{ijk}} \\ (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m)_{z_{ijk}} \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \mu_0 \begin{bmatrix} \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial x} \\ \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial y} \\ \frac{\partial(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)}{\partial z} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

na qual

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \sigma_m)_{x_{ijk}} &= \left( \frac{(\sigma_{m_{xx}})_{(i)(j)(k)} - (\sigma_{m_{xx}})_{(i-1)(j)(k)}}{\Delta_x} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j+1/2)(k)} - (\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}}{\Delta_y} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{xz}})_{(i-1/2)(j)(k+1/2)} - (\sigma_{m_{xz}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}}{\Delta_z} \right), \quad (3.65)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \sigma_m)_{y_{ijk}} &= \left( \frac{(\sigma_{m_{yy}})_{(i)(j)(k)} - (\sigma_{m_{yy}})_{(i)(j-1)(k)}}{\Delta_y} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{yx}})_{(i+1/2)(j-1/2)(k)} - (\sigma_{m_{yx}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}}{\Delta_x} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k+1/2)} - (\sigma_{m_{yz}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}}{\Delta_z} \right) \quad (3.66)
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \sigma_m)_{z_{ijk}} &= \left( \frac{(\sigma_{m_{zz}})_{(i)(j)(k)} - (\sigma_{m_{zz}})_{(i)(j)(k-1)}}{\Delta_z} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{zx}})_{(i+1/2)(j)(k-1/2)} - (\sigma_{m_{zx}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}}{\Delta_x} \right) + \\
 &+ \left( \frac{(\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j+1/2)(k-1/2)} - (\sigma_{m_{zy}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}}{\Delta_y} \right). \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

A Figura 3.13 ilustra a localização do potencial escalar magnético, das aproximações do tensor magnético nas arestas e das coordenadas da divergência do tensor magnético (componentes da força magnética).

---

**Algorithm 4:** Cálculo da força magnética

---

**Entrada:**  $\mu_c, \mu_d$

**Saída:**  $\mathbf{f}_m$

**início**

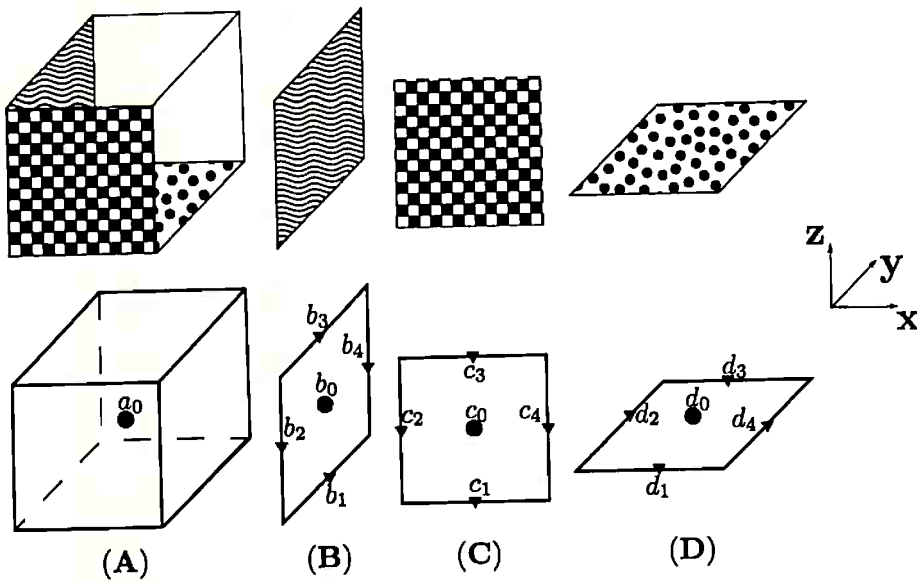
- 1) calcular a permeabilidade:  $\mu(\phi) = \mu_d + (\mu_c - \mu_d)H(\phi)$ ;
- 2) determinar o potencial escalar magnético:  $\nabla \cdot (\mu(\phi)\nabla\psi) = 0$ ;
- 3) calcular o campo magnético  $\mathbf{H}$  com a equação (3.44) ;
- 4) calcular o tensor magnético  $\sigma_m$  com as equações (3.46)-(3.51) ;
- 5) interpolar as componentes do tensor  $\sigma_m$  para as faces com as equações (3.52)-(3.63);
- 6) determinar a força magnética  $\mathbf{f}_m$  com a equação (3.64);

**fim**

---

### 3.7 Sumário da metodologia numérica

A presente seção termina o capítulo com um sumário da discretização para um passo no tempo típico. Por simplicidade, os subíndices espaciais  $i, j, k$  não são aplicados. Os valores calculados de pressão  $p^k$ , posição dos pontos na interface  $\mathbf{X}^k$ , de campo de velocidade  $\mathbf{u}^k$  e da densidade de força  $\mathbf{f}^k$ , no tempo  $t = t^k$  para  $k = n, n - 1$ , são atualizados para cada uma destas variáveis, no instante



**Figura 3.13:** Local da célula computacional onde variáveis discretas são calculadas: as variáveis potencial escalar magnético,  $\psi_{ijk}$ , as componentes  $h_{xijk}$ ,  $h_{yijk}$  e  $h_{zijk}$  do campo magnético, as componentes  $(\sigma_{m_{xx}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{yy}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{zz}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{xy}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{yz}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{zx}})_{ijk}$ ,  $(\sigma_{m_{xy}})_{ijk}$  e  $(\sigma_{m_{yz}})_{ijk}$  do tensor magnético são calculadas no centro da célula computacional ( $a_0$ ); a componente da força magnética na direção  $x$ ,  $f_{m_x} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{xijk}$ , é calculada no centro da face  $yz$  ( $b_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{xx}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{yy}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}$ ,  $(\sigma_{m_{zz}})_{(i-1/2)(j)(k+1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i-1/2)(j+1/2)(k)}$ , respectivamente nos pontos  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$  e  $b_4$ ; a componente da força magnética na direção  $y$ ,  $f_{m_y} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{yijk}$ , é calculada no centro da face  $xz$  ( $c_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{yy}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{yz}})_{(i-1/2)(j-1/2)(k)}$ ,  $(\sigma_{m_{zx}})_{(i)(j-1/2)(k+1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i+1/2)(j-1/2)(k)}$ , respectivamente nos pontos  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  e  $c_4$ ; a componente da força magnética na direção  $z$ ,  $f_{m_z} = (\nabla \cdot \sigma_m)_{zijk}$ , é calculada no centro da face  $xy$  ( $d_0$ ), nesta mesma face são aproximadas as componentes  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j-1/2)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{zz}})_{(i-1/2)(j)(k-1/2)}$ ,  $(\sigma_{m_{xy}})_{(i)(j+1/2)(k-1/2)}$  e  $(\sigma_{m_{zz}})_{(i+1/2)(j)(k-1/2)}$  respectivamente nos pontos  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $d_3$  e  $d_4$ .

de tempo  $t^{n+1}$ , nas diferentes discretizações do presente Capítulo resumidas aqui, como segue.

A função indicadora de fluidos (Seção 3.4) atualiza as propriedades materiais:

$$\phi^{n+1} = \phi(\mathbf{X}^n),$$

se uma das fases é magnética, a força magnética (Seção 3.6.3) é contabilizada:

$$\mathbf{f}_m^n = \mathbf{D} \cdot \sigma_m$$

na presença de surfactante (Seção 3.6.1) a concentração  $\Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1}$  é calculada:

$$A_k^{n+1} \Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1} - A_k^n \Gamma_{\hat{S}_k}^n = \frac{1}{\zeta} \Delta t \sum_{i=1}^3 l_{e_i}^{n+1} \left( \frac{\Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1} - \Gamma_{\hat{S}_k}^{n+1}}{d_{S_k|S_k}^{n+1}} \right),$$

a força de tensão superficial (Seção 3.6.2) é calculada e espalhada (Seção 3.5.4):

$$\sigma_k = \sigma_0(1 - \beta \Gamma_{\hat{S}_k}),$$

$$\mathbf{f}_s^n = (\mathcal{S}_n \mathbf{F}_{s_k})(\mathbf{x}^n) = \sum_{\alpha \in S_h} \mathbf{F}_{s_k}(\sigma_k(\alpha)) \delta_h^3(\mathbf{x}^n - \mathbf{X}(\alpha, t^n)) \Delta \alpha,$$

(3.68)

o termo forçante  $\mathbf{f}^n$  contabiliza todas as forças atuantes no escoamento:

$$\mathbf{f}^n = \mathbf{f}_s^n + \mathbf{f}_m^n + \mathbf{f}_g^n$$

$$\tilde{\mathbf{f}}^n = -\xi \mathbf{L} \mathbf{u}^n - \rho (\mathbf{u}^n \cdot \mathbf{G}) \mathbf{u}^n + \mathbf{D} \cdot [\mu (\mathbf{G} \mathbf{u}^n + (\mathbf{G} \mathbf{u}^n)^T)] + \mathbf{f}^n.$$

as equações de Navier-Stokes (Seção 3.5) são discretizadas no tempo por um esquema semi-implícito (Seção 3.5.2) e resolvida por um método de projeção (Seção 3.5.1):

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = \theta_2 \left( \frac{\xi \mathbf{L} \mathbf{u}^* - \mathbf{G} p^n}{\rho^n} \right) + \frac{\theta_1 \mathbf{g}^n + \theta_0 \mathbf{g}^{n-1}}{\rho^n} + \frac{\beta_1 \tilde{\mathbf{f}}^n + \beta_0 \tilde{\mathbf{f}}^{n-1}}{\rho^n},$$

$$\mathbf{D} \cdot \left[ \frac{1}{\rho^n} \mathbf{G} q \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^*,$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\mathbf{G} q}{\rho^n},$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0,$$

$p^{n+1} = p^n + q$ , a velocidade é interpolada (Seção 3.5.4):

$$\mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n) = (\mathcal{S}_n^* \mathbf{u}^{n+1})(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Omega_h} \mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x}^n) \delta_h^3(\mathbf{x}^n - \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t^n)) \Delta x \Delta y \Delta z,$$

a interface se movimenta com a velocidade do escoamento (Seção 3.5.5):

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \Delta t^n \left( 1 + \frac{\omega^n}{2} \right) \mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n) + \Delta t^n \left( -\frac{\omega^n}{2} \right) \mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1}),$$

(3.69)

### 3.7.1 Algoritmo para o modelo de um escoamento bifásico não condutor submetido à uma força magnética

Os passos da resolução numérica do modelo de um escoamento bifásico não condutor submetido à uma força magnética são apresentados no Algoritmo (5).

### 3.7.2 Algoritmo para o modelo de um escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel

Os passos da resolução numérica do modelo de um escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel, são sintetizados no Algoritmo (6).

**Algorithm 5:** Escoamento bifásico não condutor submetido à uma força magnética

**Entrada:** domínios euleriano e lagrangiano, número de níveis de refinamento, propriedades físicas, condições iniciais e de fronteira, passo no tempo inicial, tempo total de simulação

**Saída:** campo de velocidades, campo magnético, pressão e posição da interface

**inicio**

inicialização;

aplicar as condições iniciais e de fronteira;

**repita**

- 1) determinar o passo temporal como descrito na Seção 3.5.3;
- 2) calcular a função indicadora (Seção 3.4) e a posição inicial das propriedades físicas com Função de Heaviside (2.3) ;
- 3) aplicar o Algoritmo (4) para determinar a força magnética  $f_m$ ;
- 4) calcular a força de tensão superficial (3.43) e distribuir no domínio euleriano com o operador de espalhamento (3.30) ;
- 5) determinar o campo de velocidade auxiliar  $u^*$  da equação (3.23);
- 6) calcular a correção de pressão  $q$  obtida de (3.24)-(3.26);
- 7) determinar o campo de velocidades  $u^{n+1}$  com a equação (3.27);
- 8) interpolar o campo de velocidades para a interface lagrangiana com (3.31);
- 9) atualizar a posição da interface lagrangiana com a expressão (3.34);
- 10) aplicar o Algoritmo (2), de otimização de malha;
- 11) empregar a correção de volume do Algoritmo (3);

*até o tempo final da simulação ;*

**fim**

**Algorithm 6:** Escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel

**Entrada:** domínios euleriano e lagrangiano, número de níveis de refinamento, propriedades físicas, condições iniciais e de fronteira, passo no tempo inicial, tempo total de simulação

**Saída:** campo de velocidades, pressão e posição da interface

**inicio**

inicialização;

aplicar as condições iniciais e de fronteira;

**repita**

- 1) determinar o passo temporal como descrito na Seção 3.5.3;
- 2) calcular a função indicadora (Seção 3.4) e a posição inicial das propriedades físicas com Função de Heaviside (2.3) ;
- 3) determinar a concentração de surfactante  $\Gamma$  com o sistema de equações (3.38);
- 4) calcular o coeficiente de tensão superficial em função da concentração de surfactante pela equação (2.14);
- 5) calcular a força de tensão superficial (3.43) e distribuir no domínio euleriano com o operador de espalhamento (3.30) ;
- 6) determinar o campo de velocidade auxiliar  $u^*$  da equação (3.23);
- 7) calcular a correção de pressão  $q$  obtida de (3.24)-(3.26);
- 8) determinar o campo de velocidades  $u^{n+1}$  com a equação (3.27);
- 9) interpolar o campo de velocidades para a interface lagrangiana com (3.31);
- 10) atualizar a posição da interface lagrangiana com a expressão (3.34);
- 11) aplicar o Algoritmo (2), de otimização de malha;
- 12) empregar a correção de volume do Algoritmo (3);

*até o tempo final da simulação ;*

**fim**



## Capítulo 4

# Resultados: verificações

As verificações das implementações dos esquemas numéricos empregados nas discretizações das equações do escoamento da fase contínua, na força magnética e na dinâmica de surfactante insolúvel, descritos no Capítulo 3, são apresentadas no presente capítulo. Tais verificações numéricas utilizam a estratégia de “soluções manufaturadas” para uma análise de convergência descrita na Seção 4.1. Essa verificação é empregada na Seção 4.2 para o esquema numérico utilizado na resolução das equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível, na Seção 4.3 para a discretização da força magnética e na Seção 4.4.1 para o esquema de volumes finitos empregado na discretização da dinâmica de surfactante insolúvel. A verificação da conservação discreta de massa total de surfactante é realizada na Seção 4.4.2. Na Seção 4.5 a otimização de malha lagrangiana é avaliada quanto ao custo computacional e a melhora na qualidade da malha. O capítulo finaliza com a avaliação do custo computacional da presente metodologia na Seção 4.6.

### 4.1 Normas, análise de convergência numérica e domínio discreto

As normas empregadas na avaliação dos erros na análise de convergência numérica por solução manufaturada, tanto em malhas estruturadas (uniformes ou compostas) quanto em malhas não estruturadas triangulares, são apresentadas na presente seção.

Em malhas estruturadas deslocadas como as do tipo MAC (Figura 3.1), uniformes ou compostas, as variáveis escalares e vetoriais são posicionadas em quatro diferentes domínios discretos, dependendo das posições que ocupam nas células computacionais discretizam o domínio físico  $\Omega$ :  $\Omega_p^h$ , a união de todos os centros de células, onde posiciona-se toda variável escalar,  $\Omega_u^h$ , a união dos centros das faces nas direções  $y$  e  $z$  das células computacionais, empregada para a componente na direção  $x$  de toda variável vetorial,  $\Omega_v^h$ , a união dos centros das faces nas direções  $x$  e  $z$  das células computacionais, empregada para a componente na direção  $y$  de toda variável vetorial e  $\Omega_w^h$ , a união dos centros das faces nas direções  $x$  e  $y$  das células computacionais, empregada para a componente na direção  $z$  de todas as variáveis vetoriais. Usando essas posições a norma  $\|\cdot\|_2$  de uma variável escalar  $\phi$  é definida em  $\Omega_p^h$  como

$$\|\phi\|_2 = \left( \sum_{k \in \Omega_p^h} |\phi_k|^2 h_{k_x} h_{k_y} h_{k_z} \right)^{1/2}, \quad (4.1)$$

onde  $\phi_k$  é o valor assumido por  $\phi$  no centro da  $k$ -ésima célula cujas arestas medem  $h_{k_x} = \Delta x$ ,  $h_{k_y} = \Delta y$  e  $h_{k_z} = \Delta z$ . Para uma variável vetorial  $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$   $\psi_1$  estará posicionada em  $\Omega_u^h$ ,  $\psi_2$  em  $\Omega_v^h$  e  $\psi_3$  em  $\Omega_w^h$  e

$$\|\psi\|_2 = \left( \sum_{i \in \Omega_u^h} |\psi_{1i}|^2 a_i + \sum_{j \in \Omega_v^h} |\psi_{2j}|^2 b_j + \sum_{k \in \Omega_w^h} |\psi_{3k}|^2 c_k \right)^{1/2}$$

onde  $a_i = h_i^3(r+1)/(2r^3)$  para faces na interface entre níveis  $l$  e  $l+1$ ,  $a_i = h_i^3/r^3$  para o nível  $l+1$  e  $a_i = h_i^3$  para o nível  $l$ , com  $r$  a razão de refinamento entre os níveis  $l$  e  $l+1$ , e  $h_l$  o comprimento da aresta do nível  $l$ . Os pesos  $b_j$  e  $c_k$  são definidos de maneira similar.

Na malha não estruturada triangular utilizada no presente trabalho para representar o domínio lagrangiano  $S$ , as variáveis escalares são discretizadas em cada célula computacional triangular  $\hat{S}_k$  no ponto  $X_{\hat{S}_k}$ , o circuncentro projetado no triângulo curvo associado, ilustrado na Figura 3.8. As normas  $\|\cdot\|_2$  e  $\|\cdot\|_\infty$  para uma variável escalar  $\phi$  localizada em  $X_{\hat{S}_k}$  são definidas como

$$\|\phi\|_2 = \left( \sum_{k \in X_{\hat{S}_k}} |\phi_k|^2 A_k \right)^{1/2}, \quad (4.2)$$

$$\|\phi\|_\infty = \max_{k \in X_{\hat{S}_k}} \{|\phi_k|\}, \quad (4.3)$$

onde  $\phi_k$  é o valor assumido por  $\phi$  em  $X_{\hat{S}_k}$  de cada  $k$ -ésima célula,  $S_k$ , triangular cuja área é denotada por  $A_k$ .

A análise de convergência numérica assume que o método é convergente e tem ordem  $q$ . Por exemplo, a solução numérica de uma função escalar “suave”  $\phi$ , por hipótese, pode ser escrita como

$$\phi(\mathbf{x}, t, h) = \phi_e(\mathbf{x}, t) + C(\mathbf{x}, t)h^q + O(h^{q+1}) \quad (4.4)$$

para todo espaçamento (ou passo no tempo) suficientemente pequeno  $h$ , sendo  $\phi_e(\mathbf{x}, t)$  a solução exata e  $C(\mathbf{x}, t)$  um coeficiente independente de  $h$ . Nos problemas-modelo empregados nas seções a seguir, a solução exata será conhecida *a priori*. Tal abordagem é comumente denominada como “verificação por solução manufaturada” (Oberkampf e Trucano, 2002; Roache, 2009) e é o padrão de verificação da correta implementação de metodologias numéricas aceito na atualidade. As taxas de convergência numérica são comparadas com a taxa esperada teoricamente empregando valores aproximados de  $\phi(\mathbf{x}, t)$  para malhas sucessivamente mais finas. A Figura 4.2 ilustra esse procedimento de subdivisão para uma região do domínio lagrangiano. Para espaçamentos suficientemente pequenos, tem-se

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, t, h) &\approx \phi_e(\mathbf{x}, t) + C(\mathbf{x}, t)h^q, \\ \phi(\mathbf{x}, t, \frac{h}{2}) &\approx \phi_e(\mathbf{x}, t) + C(\mathbf{x}, t)\left(\frac{h}{2}\right)^q, \end{aligned}$$

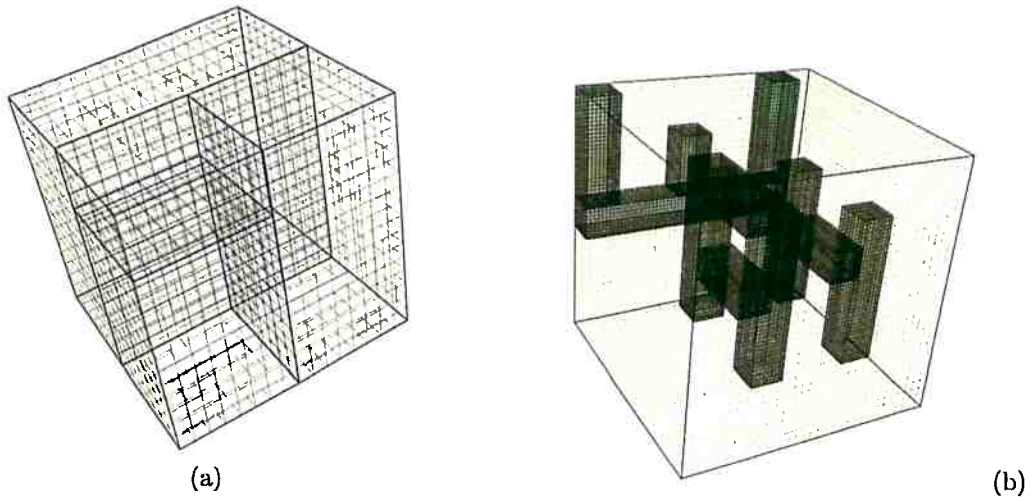
permitindo uma aproximação para a ordem de convergência

$$\log_2 \left( \frac{\|\phi(\mathbf{x}, t, h) - \phi_e(\mathbf{x}, t)\|}{\|\phi(\mathbf{x}, t, \frac{h}{2}) - \phi_e(\mathbf{x}, t)\|} \right) \approx q, \quad (4.5)$$

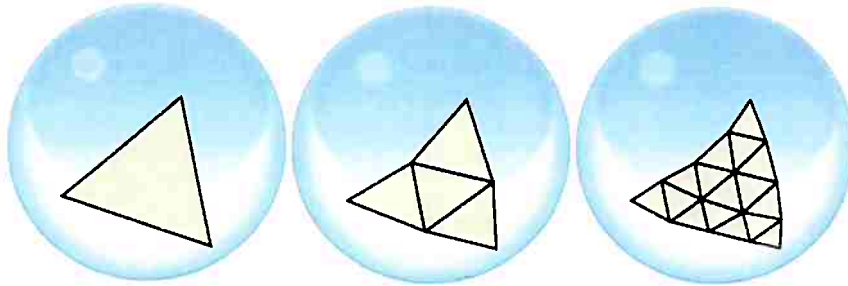
onde  $\|\cdot\|$  representa a norma 4.3, 4.2 ou 4.1.

As verificações da metodologia numérica no domínio euleriano foram realizadas em um domínio computacional paralelepípedico com três discretizações diferentes: uma malha uniforme num único bloco, uma malha uniforme composta pela união de blocos no mesmo nível de refinamento (Figura 4.1(a)) e numa malha composta por dois níveis de refinamento cujo nível de maior resolução está moldado no formato das letras “W”, “A” e “H”, como mostrado na Figura 4.1(b). O uso da primeira dessas malhas tem como principal objetivo avaliar a implementação dos operadores de discretização numa malha uniforme. Com a segunda malha visa-se identificar possíveis problemas na comunicação entre os blocos estruturados e com a terceira malha pretende-se verificar as operações entre diferentes níveis de refinamento.

Para o domínio lagrangiano, uma esfera é discretizada por uma malha triangular conhecida na literatura por “domo geodésico” (Sahr *et al.*, 2003) e quatro diferentes resoluções de malha contendo 320, 5120, 20480 e 81920 triângulos são utilizadas nas verificações e essas são descritas com maiores



**Figura 4.1:** Malhas utilizadas na verificação numérica por meio de solução manufaturada: (a) malha composta pela união de blocos e (b) malha composta, bloco-estruturada com um nível de refinamento, representando as letras *W*, *A* e *H*.



**Figura 4.2:** Exemplo de subdivisões de uma região da malha lagrangiana em triângulos, utilizadas na verificação numérica por meio de solução manufaturada.

detalhes na Seção 4.4.

## 4.2 Equação de Navier Stokes

Note que o presente trabalho utiliza-se da implementação da metodologia numérica para a resolução da equação de Navier-Stokes realizada por [Pivello \*et al.\* \(2014\)](#) que é verificada nesta seção antes do uso. A estratégia numérica proposta à equação de Navier-Stokes (2.1) é verificada testando a metodologia na solução das equações

$$\begin{aligned} \rho \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] &= -\nabla p + \nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}_{\text{NS}}(\mathbf{x}, t), \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

na qual  $\mathbf{f}_{\text{NS}}(\mathbf{x}, t)$  é um termo forçante.

A densidade e a viscosidade da solução manufaturada para (4.6) são definidas como

$$\rho_e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{10} \sin(2\pi\kappa(x+y+z)+t) \cos(2\pi\kappa(x+y+z)+t) + 1, \quad (4.7)$$

$$\eta_e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{10} \sin(2\pi\kappa(x+y+z)+t) \cos(2\pi\kappa(x+y+z)+t) + 1, \quad (4.8)$$

o campo de velocidade

$$u_{x,e}(\mathbf{x}, t) = -\frac{Ae^{\omega^2(-t)}(\omega L \cos(\kappa x) \sin(Ly) \sin(mz) + \kappa m \sin(\kappa x) \cos(Ly) \cos(mz))}{\kappa^2 + L^2}, \quad (4.9)$$

$$u_{y,e}(\mathbf{x}, t) = \frac{Ae^{\omega^2(-t)}(\kappa \omega \sin(\kappa x) \cos(Ly) \sin(mz) - Lm \cos(\kappa x) \sin(Ly) \cos(mz))}{\kappa^2 + L^2}, \quad (4.10)$$

$$u_{z,e}(\mathbf{x}, t) = Ae^{\omega^2(-t)} \cos(\kappa x) \cos(Ly) \sin(mz), \quad (4.11)$$

cujo divergente é nulo, e o campo de pressão

$$\begin{aligned} p_e(\mathbf{x}, t) = & \frac{1}{2} \left( \frac{1}{10} \sin(2\pi\kappa(x+y+z)+t) \cos(2\pi\kappa(x+y+z)+t) + 1 \right) \quad (4.12) \\ & \left( \frac{A^2 e^{-2\omega^2 t} (\kappa \omega \sin(\kappa x) \cos(Ly) \sin(mz) - Lm \cos(\kappa x) \sin(Ly) \cos(mz))^2}{(\kappa^2 + L^2)^2} \right) + \\ & + \left( \frac{A^2 e^{-2\omega^2 t} (\omega L \cos(\kappa x) \sin(Ly) \sin(mz) + \kappa m \sin(\kappa x) \cos(Ly) \cos(mz))^2}{(\kappa^2 + L^2)^2} \right) + \\ & + \left( A^2 e^{-2\omega^2 t} \cos^2(\kappa x) \cos^2(Ly) \sin^2(mz) \right), \end{aligned}$$

onde  $0 \leq t \leq 1 \times 10^{-2}$  s,  $(x, y, z) = \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ ,

$L$	$L_x$	$L_y$	$L_z$	$A$	$\kappa$	$m$	$\omega$
1	1	1	1	1	1	1	$\sqrt{\kappa^2 + L^2 + m^2}$

e com termo forçante

$$\mathbf{f}_{\text{NSE}}(\mathbf{x}, t) = \rho_e \left[ \frac{\partial \mathbf{u}_e}{\partial t} + (\mathbf{u}_e \cdot \nabla) \mathbf{u}_e \right] + \nabla p_e - \nabla \cdot [\eta (\nabla_e \mathbf{u}_e + \nabla \mathbf{u}_e^T)],$$

onde  $\mathbf{u}_e = (u_{x,e}, u_{y,e}, u_{z,e})$  e as condições iniciais por  $u_x(\mathbf{x}, 0) = u_{x,e}(\mathbf{x}, 0)$ ,  $u_y(\mathbf{x}, 0) = u_{y,e}(\mathbf{x}, 0)$ ,  $u_z(\mathbf{x}, 0) = u_{z,e}(\mathbf{x}, 0)$  e  $p(\mathbf{x}, 0) = p_e(\mathbf{x}, 0)$ .

Como mencionado na Seção 4.1 três malhas são usadas na verificação numérica do domínio euleriano, uma malha uniforme com um único bloco, uma malha composta pela união de blocos de um mesmo nível de refinamento (Figura 4.1(a)) e uma malha composta por dois níveis de refinamento (Figura 4.1(b)). Os resultados para uma malha uniforme e para uma composta pela união de blocos de mesmo nível foram idênticos e são mostrados na Tabela 4.1, para a malha composta com dois níveis de refinamento os resultados são mostrados na Tabela 4.2. Nessa seção todas as verificações adotaram condições de contorno de Dirichlet para a velocidade e condição homogênea de Neumann para a correção de pressão. Constata-se ordem dois para a velocidade e

$N$	$\ u_x - u_{x,e}\ _2$	$q$	$\ u_y - u_{y,e}\ _2$	$q$	$\ u_z - u_{z,e}\ _2$	$q$	$\ p - p_e\ _2$	$q$
$16^3$	$5.072 \times 10^{-2}$	—	$1.014 \times 10^{-1}$	—	$7.086 \times 10^{-2}$	—	$1.352 \times 10^0$	—
$32^3$	$6.289 \times 10^{-3}$	3.012	$1.241 \times 10^{-2}$	3.031	$6.818 \times 10^{-3}$	3.378	$1.949 \times 10^{-1}$	2.794
$64^3$	$1.363 \times 10^{-3}$	2.206	$2.679 \times 10^{-3}$	2.212	$1.451 \times 10^{-3}$	2.233	$5.435 \times 10^{-2}$	1.843
$128^3$	$3.276 \times 10^{-4}$	2.057	$6.442 \times 10^{-4}$	2.056	$3.408 \times 10^{-4}$	2.090	$1.564 \times 10^{-2}$	1.797

**Tabela 4.1:** Erro e ordem de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com ciclo  $W$  no multigrid, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.

ordem entre um e dois para a pressão que são as ordens esperadas para a discretização utilizada.

$N$	$\ u_x - u_{x,e}\ _2$	$q$	$\ u_y - u_{y,e}\ _2$	$q$	$\ u_z - u_{z,e}\ _2$	$q$	$\ p - p_e\ _2$	$q$
$16^3$	$4.840 \times 10^{-2}$	—	$9.500 \times 10^{-2}$	—	$7.083 \times 10^{-2}$	—	$1.370 \times 10^0$	—
$32^3$	$6.193 \times 10^{-3}$	2.966	$1.194 \times 10^{-2}$	2.993	$7.313 \times 10^{-3}$	3.276	$2.222 \times 10^{-1}$	2.624
$64^3$	$1.377 \times 10^{-3}$	2.169	$2.598 \times 10^{-3}$	2.200	$1.643 \times 10^{-3}$	2.154	$6.183 \times 10^{-2}$	1.845
$128^3$	$3.447 \times 10^{-4}$	1.998	$6.273 \times 10^{-4}$	2.050	$4.053 \times 10^{-4}$	2.020	$1.800 \times 10^{-2}$	1.781

**Tabela 4.2:** Erro e ordem de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta com dois níveis de refinamento, com ciclo  $W$  no multigrid, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.

### 4.3 Força magnética

A estratégia numérica proposta à equação de força magnética (2.24) é verificada testando a metodologia na solução das equações do potencial escalar magnético e do tensor magnético

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\mu \nabla \psi) &= 0 \text{ em } \Omega, \\
 \mathbf{H} &= \nabla \psi, \\
 \boldsymbol{\sigma}_m &= \mu(\mathbf{H} \otimes \mathbf{H}), \\
 \mathbf{f}_m &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Para o teste atribuímos à solução exata de (4.13) a função potencial escalar magnético

$$\psi_e(\mathbf{x}, t) = \sin\left(\frac{2\pi x}{b_1 - a_1}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{a_2 - b_2}\right) - a_3 b_3 z + \frac{a_3 z^2}{2} + \frac{b_3 z^2}{2} - \frac{z^3}{3}, \tag{4.14}$$

no qual  $(x, y, z) = \mathbf{x} \in [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times [a_3, b_3] = \mathbf{x} \in [-0.16, 0.16] \times [-0.16, 0.16] \times [-0.16, 0.16]$ . Tomamos a permeabilidade magnética

$$\mu_e(x, y, z, t) = \sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1 - a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2 - a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3 - a_3}\right) + 1, \tag{4.15}$$

o campo magnético  $\mathbf{H}_e = ((H_e)_x, (H_e)_y, (H_e)_z)$ ,

$$(H_e)_x(\mathbf{x}, t) = \frac{2\pi \cos\left(\frac{2\pi x}{b_1 - a_1}\right)}{b_1 - a_1}, \tag{4.16}$$

$$(H_e)_y(\mathbf{x}, t) = -\frac{2\pi \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2 - b_2}\right)}{a_2 - b_2}, \tag{4.17}$$

$$(H_e)_z(\mathbf{x}, t) = -a_3 b_3 + a_3 z + b_3 z - z^2, \tag{4.18}$$

as componentes do tensor magnético  $\sigma_{m_e}$ :

$$(\sigma_{m_e})_{xx} = \frac{4\pi^2 \cos^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2-a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3-a_3}\right) + 1\right)}{(b_1-a_1)^2}, \quad (4.19)$$

$$(\sigma_{m_e})_{yy} = \frac{4\pi^2 \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right) \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2-a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3-a_3}\right) + 1\right)}{(a_2-b_2)^2}, \quad (4.20)$$

$$(\sigma_{m_e})_{zz} = (a_3-z)^2(b_3-z)^2 \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2-a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3-a_3}\right) + 1\right), \quad (4.21)$$

$$(\sigma_{m_e})_{xy} = (\sigma_{m_e})_{yx} = -\frac{4\pi^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(b_1-a_1)(a_2-b_2)}, \quad (4.22)$$

$$(\sigma_{m_e})_{xz} = \frac{2\pi(a_3-z)(b_3-z) \cos\left(\frac{2\pi x}{a_1-b_1}\right) \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2-a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3-a_3}\right) + 1\right)}{a_1-b_1}, \quad (4.23)$$

$$(\sigma_{m_e})_{yz} = \frac{2\pi(a_3-z)(b_3-z) \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right) \left(\sin^2\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{b_2-a_2}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi z}{b_3-a_3}\right) + 1\right)}{a_2-b_2}, \quad (4.24)$$

e as componentes da força magnética representadas pelo divergente do tensor magnético

$$(\nabla \cdot \sigma_{m_e})_x = \frac{2\pi(-2z) \cos\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right)}{(b_1-a_1)} - \frac{8\pi^3 \cos\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(b_1-a_1)(a_2-b_2)^2} - \frac{16\pi^3 \sin\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right)}{(b_1-a_1)^3} \quad (4.25)$$

$$(\nabla \cdot \sigma_{m_e})_y = -\frac{2\pi(-2z) \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(a_2-b_2)} + \frac{8\pi^3 \sin\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(b_1-a_1)^2(a_2-b_2)} + \frac{16\pi^3 \sin\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(a_2-b_2)^3} \quad (4.26)$$

$$(\nabla \cdot \sigma_{m_e})_z = -\frac{4\pi^2 \left(\frac{16}{625} - z^2\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{b_1-a_1}\right)}{(b_1-a_1)^2} - \frac{4\pi^2 \left(\frac{16}{625} - z^2\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a_2-b_2}\right)}{(a_2-b_2)^2} + 2(-2z) \left(\frac{16}{625} - z^2\right). \quad (4.27)$$

Como comentado anteriormente as verificações para o domínio euleriano são realizadas para três diferentes tipos de malha: uniforme num único bloco, composta pela união de blocos de um mesmo nível e composta com dois níveis de refinamento. As verificações nessas duas primeiras apresentaram resultados idênticos e são apresentados pelas Tabelas 4.3 a 4.6, para a terceira delas os resultados são representados nas Tabelas 4.7 a 4.10. Na resolução da função potencial escalar magnético são adotadas condição de contorno periódica nas direções  $x$ ,  $y$  e Neumann na direção  $z$ .

Os resultados da verificação mostram segunda ordem de convergência para todos as aproximações dessa seção.



$N$	$\ (\sigma_m)_{xx} - (\sigma_{m_\epsilon})_{xx}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{yy} - (\sigma_{m_\epsilon})_{yy}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{zz} - (\sigma_{m_\epsilon})_{zz}\ _2$	$q$
$32^3$	$1.723 \times 10^{+0}$	—	$2.948 \times 10^{+0}$	—	$6.252 \times 10^{-1}$	—
$64^3$	$4.338 \times 10^{-1}$	1.990	$7.379 \times 10^{-1}$	1.998	$1.354 \times 10^{-4}$	2.207
$128^3$	$1.086 \times 10^{-1}$	1.997	$1.845 \times 10^{-1}$	2.000	$3.356 \times 10^{-5}$	2.013
$256^3$	$2.717 \times 10^{-2}$	1.999	$4.614 \times 10^{-2}$	2.000	$8.389 \times 10^{-6}$	2.000

Tabela 4.3: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\sigma_m)_{xx}$ ,  $(\sigma_m)_{yy}$  e  $(\sigma_m)_{zz}$  do tensor magnético  $\sigma_m$ , em uma malha uniforme, com ciclo  $W$  no multigrid.

$N$	$\ (\sigma_m)_{xy} - (\sigma_{m_\epsilon})_{xy}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{xz} - (\sigma_{m_\epsilon})_{xz}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{yz} - (\sigma_{m_\epsilon})_{yz}\ _2$	$q$
$32^3$	$1.275 \times 10^{+0}$	—	$1.902 \times 10^{-1}$	—	$2.330 \times 10^{-1}$	—
$64^3$	$3.173 \times 10^{-1}$	2.007	$4.819 \times 10^{-2}$	1.981	$5.910 \times 10^{-2}$	1.979
$128^3$	$7.924 \times 10^{-2}$	2.002	$1.209 \times 10^{-2}$	1.995	$1.483 \times 10^{-2}$	1.995
$256^3$	$1.980 \times 10^{-2}$	2.000	$3.024 \times 10^{-3}$	1.999	$3.711 \times 10^{-3}$	1.999

Tabela 4.4: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\sigma_m)_{xy}$ ,  $(\sigma_m)_{xz}$  e  $(\sigma_m)_{yz}$  do tensor magnético  $\sigma_m$ , em uma malha uniforme, com ciclo  $W$  no multigrid.

$N$	$\ \psi - \psi_\epsilon\ _2$	$q$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_x - (\nabla \cdot \sigma_{m_\epsilon})_x\ _2$	$q$
$32^3$	$3.262 \times 10^{-3}$	—	$1.200 \times 10^{+2}$	—
$64^3$	$8.134 \times 10^{-4}$	2.004	$2.982 \times 10^{+1}$	2.008
$128^3$	$2.032 \times 10^{-4}$	2.001	$7.462 \times 10^{+0}$	1.999
$256^3$	$5.079 \times 10^{-5}$	2.000	$1.866 \times 10^{+0}$	1.999

Tabela 4.5: Erro e a ordem de convergência da função potencial escalar magnético  $\phi$  e da componente  $(\nabla \cdot \sigma_m)_x$  do divergente do tensor magnético, em uma malha uniforme, com ciclo  $W$  no multigrid, condições de contorno periódica nas direções  $x$ ,  $y$  e Neumann na direção  $z$  para a função potencial escalar magnético.

$N$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_y - (\nabla \cdot \sigma_{m_\epsilon})_y\ _2$	$q$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_z - (\nabla \cdot \sigma_{m_\epsilon})_z\ _2$	$q$
$32^3$	$1.949 \times 10^{+2}$	—	$1.300 \times 10^{+1}$	—
$64^3$	$4.695 \times 10^{+1}$	2.053	$3.450 \times 10^{+0}$	1.914
$128^3$	$1.166 \times 10^{+1}$	2.009	$8.787 \times 10^{-1}$	1.973
$256^3$	$2.914 \times 10^{+0}$	2.001	$2.207 \times 10^{-1}$	1.993

Tabela 4.6: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\nabla \cdot \sigma_m)_y$  e  $(\nabla \cdot \sigma_m)_z$  do divergente do tensor magnético, em uma malha uniforme, com ciclo  $W$  no multigrid.

$N$	$\ (\sigma_m)_{xx} - (\sigma_{m_\epsilon})_{xx}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{yy} - (\sigma_{m_\epsilon})_{yy}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{zz} - (\sigma_{m_\epsilon})_{zz}\ _2$	$q$
$32^3$	$1.728 \times 10^{+0}$	—	$2.961 \times 10^{+0}$	—	$5.670 \times 10^{-1}$	—
$64^3$	$4.352 \times 10^{-1}$	1.989	$7.412 \times 10^{-1}$	1.998	$1.366 \times 10^{-4}$	2.053
$128^3$	$1.090 \times 10^{-1}$	1.997	$1.853 \times 10^{-1}$	2.000	$3.538 \times 10^{-5}$	1.949
$256^3$	$2.727 \times 10^{-2}$	1.999	$4.630 \times 10^{-2}$	2.000	$8.941 \times 10^{-6}$	1.984

Tabela 4.7: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\sigma_m)_{xx}$ ,  $(\sigma_m)_{yy}$  e  $(\sigma_m)_{zz}$  do tensor magnético  $\sigma_m$ , em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo  $W$  no multigrid.

$N$	$\ (\sigma_m)_{xy} - (\sigma_{m\epsilon})_{xy}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{xz} - (\sigma_{m\epsilon})_{xz}\ _2$	$q$	$\ (\sigma_m)_{yz} - (\sigma_{m\epsilon})_{yz}\ _2$	$q$
$32^3$	$1.314 \times 10^{+0}$	—	$1.972 \times 10^{-1}$	—	$2.475 \times 10^{-1}$	—
$64^3$	$3.273 \times 10^{-1}$	2.005	$4.962 \times 10^{-2}$	1.990	$6.246 \times 10^{-2}$	1.986
$128^3$	$8.177 \times 10^{-2}$	2.001	$1.241 \times 10^{-2}$	2.000	$1.563 \times 10^{-2}$	1.998
$256^3$	$2.044 \times 10^{-2}$	2.000	$3.099 \times 10^{-3}$	2.001	$3.907 \times 10^{-3}$	2.000

Tabela 4.8: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\sigma_m)_{xy}$ ,  $(\sigma_m)_{xz}$  e  $(\sigma_m)_z$  do tensor magnético  $\sigma_m$ , em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo  $W$  no multigrid.

$N$	$\ \psi - \psi_\epsilon\ _2$	$q$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_x - (\nabla \cdot \sigma_{m\epsilon})_x\ _2$	$q$
$32^3$	$3.024 \times 10^{-3}$	—	$1.366 \times 10^{+2}$	—
$64^3$	$7.541 \times 10^{-4}$	2.004	$3.800 \times 10^{+1}$	1.846
$128^3$	$1.884 \times 10^{-4}$	2.001	$1.121 \times 10^{+1}$	1.762
$256^3$	$4.711 \times 10^{-5}$	2.000	$3.497 \times 10^{+0}$	1.680

Tabela 4.9: Erro e a ordem de convergência da função potencial escalar magnético  $\psi$  e da componente  $(\nabla \cdot \sigma_m)_x$  do divergente do tensor magnético, em uma composta com dois níveis de refinamento, com ciclo  $W$  no multigrid, condições de contorno periódica nas direções  $x$ ,  $y$  e Neumann na direção  $z$  para a função potencial escalar magnético.

$N$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_y - (\nabla \cdot \sigma_{m\epsilon})_y\ _2$	$q$	$\ (\nabla \cdot \sigma_m)_z - (\nabla \cdot \sigma_{m\epsilon})_z\ _2$	$q$
$32^3$	$2.007 \times 10^{+2}$	—	$1.425 \times 10^{+1}$	—
$64^3$	$5.120 \times 10^{+1}$	1.971	$3.704 \times 10^{+0}$	1.944
$128^3$	$1.404 \times 10^{+1}$	1.866	$9.391 \times 10^{-1}$	1.980
$256^3$	$4.091 \times 10^{+0}$	1.779	$2.362 \times 10^{-1}$	1.991

Tabela 4.10: Erro e a ordem de convergência das componentes  $(\nabla \cdot \sigma_m)_y$  e  $(\nabla \cdot \sigma_m)_z$  do divergente do tensor magnético, em uma malha composta com dois níveis de refinamento, com ciclo  $W$  no multigrid.

## 4.4 Equação da dinâmica de surfactante insolúvel

O método de volumes finitos empregado na resolução da equação de advecção-difusão da concentração de surfactante insolúvel, descrito na Seção 3.6.1, foi submetido à verificação de ordem e de conservação de massa do surfactante.

### 4.4.1 Verificação numérica da ordem do método de volumes finitos aplicado

Seguindo Lenz *et al.* (2011), a função  $\Gamma_\epsilon(t, \theta, \phi) = \frac{1}{a^2(t)} \exp\left(-6 \int_0^t \frac{1}{a^2(\tau)} d\tau\right) \sin(2\theta) \cos(\phi)$ , onde  $\theta$  é a inclinação e  $\phi$  o azimute (veja a Figura 4.3), é a solução manufaturada empregada na verificação da equação de concentração de surfactante (2.30) numa esfera pulsante que expande-se e que contrai-se de acordo com o raio  $a(t) = 1 + \sin^2(\pi t)$  para  $t \in [0, 1]$ . A Figura 4.4 apresenta para alguns instantes de tempo a evolução da concentração de surfactante. Note que, nesse caso, não há escoamento externo que configure uma interação fluido-estrutura, sendo a velocidade dos pontos imposta pela variação do raio da esfera.

A simulação foi realizada para dois valores distintos de  $\Delta t$  e quatro diferentes resoluções de malha triangular: 320, 1280, 5120 e 20480 triângulos, cuja relação entre tais malhas é ilustrada na Figura 4.2 e a aresta média na Tabela 4.11. O esquema de volumes finitos mostrou-se de segunda ordem quando  $\Delta t = 1/32000 \ll h^2$ , onde  $h$  é o comprimento da maior aresta da triangularização, como ilustrado na Tabela 4.12. Se  $\Delta t = O(h)$  o esquema tem primeira ordem como apresentado

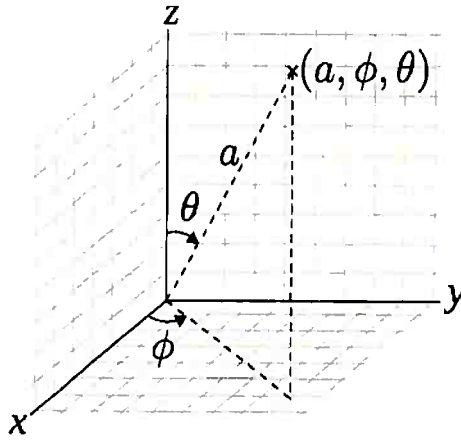


Figura 4.3: Coordenadas esféricas  $(a, \phi, \theta)$ : a distância radial  $a$ , o ângulo azimutal  $\phi$  e o ângulo radial  $\theta$ .

pela Tabela 4.13. O método apresenta segunda ordem na espaço e primeira ordem no tempo, como é esperado para a discretização utilizada.

triângulos	aresta média $h(0)$	aresta média $h(1/2)$
320	$2.993 \times 10^{-1} \pm 1.931 \times 10^{-2}$	$5.987 \times 10^{-1} \pm 3.862 \times 10^{-2}$
1280	$1.507 \times 10^{-1} \pm 9.786 \times 10^{-3}$	$3.015 \times 10^{-1} \pm 1.957 \times 10^{-2}$
5120	$7.550 \times 10^{-2} \pm 4.908 \times 10^{-3}$	$1.510 \times 10^{-1} \pm 9.815 \times 10^{-3}$
20480	$3.777 \times 10^{-2} \pm 2.456 \times 10^{-3}$	$7.553 \times 10^{-2} \pm 4.911 \times 10^{-3}$
81920	$1.889 \times 10^{-2} \pm 1.228 \times 10^{-3}$	$3.777 \times 10^{-2} \pm 2.456 \times 10^{-3}$

Tabela 4.11: Número de triângulos, tamanho médio e desvio padrão das arestas para  $t = 0$  e  $t = 1/2$ .

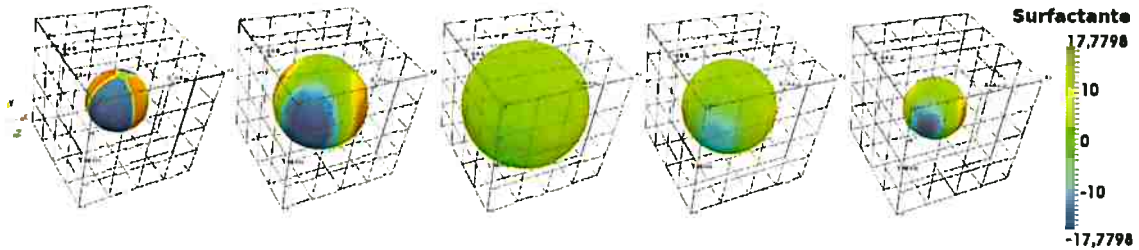


Figura 4.4: Evolução da concentração de surfactante sobre uma esfera pulsante para os instantes  $t = 0.0$ ,  $t = 0.25$ ,  $t = 0.50$ ,  $t = 0.75$  e  $t = 1.0$ .

$\max h(0)$	$\max_{t \in [0, 1]} h(t)$	$\max_{\{0 \leq t \leq 1\}} (\ \Gamma_e - \Gamma\ _\infty)$	$q_{c_\infty}$	$\max_{\{0 \leq t \leq 1\}} (\ \Gamma_e - \Gamma\ _2)$	$q_{c_2}$
$3.249 \times 10^{-1}$	$6.498 \times 10^{-1}$	$6.4153 \times 10^{-3}$	-	$9.3898 \times 10^{-3}$	-
$1.646 \times 10^{-1}$	$3.293 \times 10^{-1}$	$1.6888 \times 10^{-3}$	1.9226	$2.3431 \times 10^{-3}$	2.0027
$8.260 \times 10^{-2}$	$1.652 \times 10^{-1}$	$4.1655 \times 10^{-4}$	2.0194	$5.5421 \times 10^{-4}$	2.0800

Tabela 4.12: Erro e ordem de convergência do esquema de volumes finitos em duas normas diferentes, para  $\Delta t = 1/32000 \ll h^2$ . Para malhas com 320, 1280 e 5120 triângulos.

$\max h(0)$	$\max_{t \in [0, 1]} h(t)$	$\max_{\{0 \leq t \leq 1\}} (\ \Gamma_e - \Gamma\ _\infty)$	$q_{e\infty}$	$\max_{\{0 \leq t \leq 1\}} (\ \Gamma_e - \Gamma\ _2)$	$q_{e2}$
$1.646 \times 10^{-1}$	$3.293 \times 10^{-1}$	$3.122 \times 10^{-2}$	—	$6.852 \times 10^{-2}$	—
$8.260 \times 10^{-2}$	$1.652 \times 10^{-1}$	$1.694 \times 10^{-2}$	0.882	$3.644 \times 10^{-2}$	0.911
$4.133 \times 10^{-2}$	$8.267 \times 10^{-2}$	$8.764 \times 10^{-2}$	0.950	$1.882 \times 10^{-2}$	0.954
$2.067 \times 10^{-2}$	$4.135 \times 10^{-2}$	$4.462 \times 10^{-3}$	0.974	$9.558 \times 10^{-3}$	0.980

**Tabela 4.13:** Erro e ordem de convergência do esquema de volumes finitos em duas normas diferentes, para  $\Delta t = O(h)$ .

#### 4.4.2 Conservação numérica de massa de surfactante

A massa de surfactante é conservada com precisão de máquina, para todos os casos que a malha lagrangiana é composta apenas por triângulos acutângulos, incluindo os testes de verificação propostos por [Lenz et al. \(2011\)](#) (entre eles os da Seção 4.4.1) para os quais propriedades de conservação de massa de surfactante foram investigadas (mesmo para longos períodos de computação). Dentre as muitas abordagens bi e tridimensionais desenvolvidas para modelar e simular um escoamento bifásico na presença de surfactante insolúvel encontradas na literatura, existem poucas que podem garantir tal importante propriedade, (e.g. [Hameed et al. \(2008\)](#), [Lai et al. \(2008\)](#)). O número é ainda menor no contexto de metodologias de acompanhamento de interface *front-tracking* (incluindo formulações axissimétricas) ([Lai et al., 2008](#)).

A conservação discreta de massa de surfactante é testada empregando-se uma esfera de diâmetro 0.15m centrada em (0.5m, 0.75m, 0.5m) no interior de um cubo de aresta unitária centrado em (0.5m, 0.5m, 0.5m). Essa esfera é submetida a um campo de velocidade periódico imposto dado por ([Singh e Shyy, 2007](#))

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z, t) &= \cos(\pi t/T) \sin^2(\pi x)(\sin(2\pi z) - \sin(2\pi y)) \\
 v(x, y, z, t) &= \cos(\pi t/T) \sin^2(\pi y)(\sin(2\pi x) - \sin(2\pi z)) \\
 w(x, y, z, t) &= \cos(\pi t/T) \sin^2(\pi z)(\sin(2\pi y) - \sin(2\pi x))
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

com período  $T = 1.37 \times 10^{-1}$  s. A seleção de  $T$  foi baseada na qualidade da malha (i.e. todos os triângulos permanecem acutângulos durante o período considerado). Em  $t = 0$ , a esfera foi aproximada por uma interface triangularizada por 5120 triângulos. A concentração inicial de surfactante foi uniformemente distribuída sobre a interface (i.e.  $\Gamma \equiv 1$  em  $t = 0$ ). Note que, nesse caso, não há interação com nenhum fluido e os pontos são atualizados como na Seção 3.5.5 com o campo de velocidades definido pela expressão (4.28).

A interface deforma-se gradualmente e, devido ao campo de velocidades periódico, retorna à forma esférica inicial. A simulação é realizada a partir do tempo  $t = 0$  até segue até aproximadamente  $t_f = 1.15 \times 10$  s (em torno de 84 períodos). O passo no tempo empregado foi  $\Delta t = T/2000$  s, garantindo assim que os vértices movem-se não mais do que o comprimento médio de uma aresta por passo no tempo. O estudo envolveu aproximadamente 167340 passos de integração, na qual a massa total de surfactante é preservada no tempo com precisão de máquina, como pode ser observado na Figura 4.5-(a). A Figura 4.5-(b) mostra o estado de máxima deformação (sem a utilização de otimização de malha).

### 4.5 Avaliação da otimização de malha lagrangiana

O campo periódico reversível na Seção 4.4.2 (ou simplesmente “the vortex flow”) tem sido um teste padrão para acessar as capacidades de métodos de acompanhamento/captura de interface. A seguir, esse teste é empregado mais uma vez, agora com período  $T = 0.5$  e um passo no tempo constante igual a  $\Delta t = T/100$  para investigar o custo e a habilidade da otimização de malha,

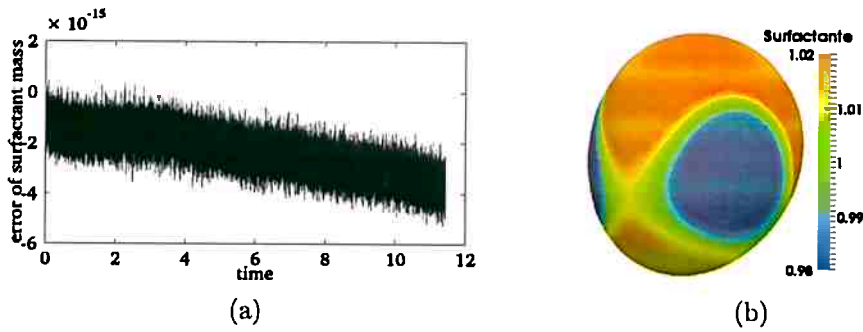


Figura 4.5: (a) Gráfico de  $M^t - M^0$  em função do tempo,  $t$ , na qual  $M^t$  é a massa total de surfactant no tempo  $t$ . (b) Concentração de surfactante em  $t = T/2$  s.

descrita na Seção 3.3.2, para manipular a malha nesse escoamento.

Um dos principais objetivos da otimização de malha lagrangiana é manter circuncentros no interior de seus triângulos, uma condição que deve ser satisfeita para que o esquema de volumes finitos usado na dinâmica de surfactante possa ser aplicado. A qualidade da malha lagrangiana resultante é mensurada pela função  $Q$ , (4.29), que compara cada triângulo da malha com um triângulo equilátero, e pela razão de aspecto entre as arestas de um triângulo (4.30). Para um triângulo  $S_k$  sua qualidade é dada por

$$Q_k = Q(S_k) = \frac{\sqrt{A_k}/P_k}{\sqrt{A_E}/P_E}, \quad (4.29)$$

onde  $A_k$  e  $P_k$  são a área e o perímetro de  $S_k$ , respectivamente, e  $A_E$  e  $P_E$  tem o mesmo significado para um triângulo equilátero. Note que todos os triângulos equiláteros tem a mesma razão entre a raiz quadrada de sua área e seu perímetro, então qualquer triângulo equilátero tem  $Q$  igual a um. Por outro lado, se um triângulo for sucessivamente esticado  $Q$  tende para zero. A função  $Q$  é parte da biblioteca GTS (“GTS library”). Outra medida de qualidade de malha triangular é a razão de aspecto que é definida como a razão entre a maior e o menor comprimento de aresta de um triângulo,

$$\iota_k = \frac{\max(l_{e_i})}{\min(l_{e_i})}, \quad i = \{1, 2, 3\}, \quad (4.30)$$

onde  $l_{e_i}$  é o comprimento da aresta definida na equação (3.41). Note que  $\iota_k$  é um para um triângulo equilátero e cresce se um triângulo é sucessivamente esticado.

Para o escoamento periódico previamente mencionado a Tabela 4.14 mostra a performance computacional quando o esquema de volumes finitos é desativado (então os custos são relativos apenas as operações lagrangianas) e o valor máximo de ângulo de um triângulo é o critério de parada para o algoritmo de otimização. A qualidade é mensurada por (4.29) e por (4.30).

Para  $t = T/2$ , com deformações de 48% e 51% aproximadamente ao longo do eixo maior e menor, respectivamente, o algoritmo de otimização é chamado 201 vezes para otimizar 1101 triângulos obtusos. A Tabela 4.14 mostra que a otimização melhora a qualidade da malha trazendo os valores de  $Q$  e da razão de aspecto  $\iota$  para próximo de um. Além disso, todos os desvios padrões diminuíram implicando que a malha é mais uniforme após a otimização. Para esse exemplo o uso da otimização cresceu progressivamente com o aumento da deformação, durante a deformação máxima o tempo de um passo no tempo cresceu em torno de 64 vezes quando comparado com um passo no tempo quando otimização não é aplicada e 69 vezes quando otimização é empregada em conjunto com o algoritmo de correção de volume (Seção 3.3.3). A Figura 4.6 mostra o estado de maior deformação da interfase sem (esquerda) e com (direita) otimização.

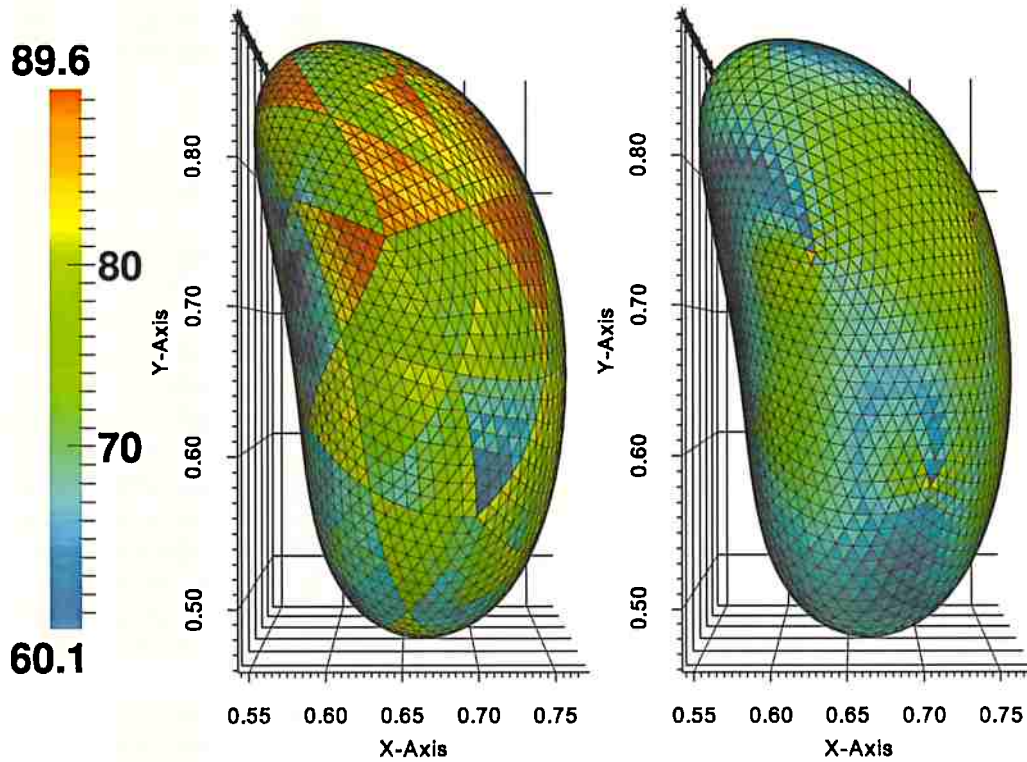
A Figura 4.7 sugere que o erro no volume e o número de chamadas do algoritmo de otimização por passo no tempo estão relacionadas com a deformação e o número de triângulos obtusos. Quando



	A none	B optimization	C optimization plus volume correction
$\angle_{min}$	17.48°	24.81°	24.81°
$\angle_{mean} \pm std(\angle)$	60.26° ± 23.94°	59.32° ± 13.16°	59.32° ± 13.16°
$\angle_{max}$	123.54°	89.59°	89.59°
$Q_{min}$	0.73	0.85	0.85
$Q_{mean} \pm std(Q)$	0.93 ± 0.06	0.98 ± 0.02	0.98 ± 0.02
$Q_{max}$	1.00	1.00	1.00
$\iota_{min}$	1.00	1.00	1.00
$\iota_{mean} \pm std(\iota)$	1.40 ± 0.30	1.16 ± 0.10	1.16 ± 0.10
$\iota_{max}$	2.59	1.76	1.76
Time spent	1.00	64.00	69.20

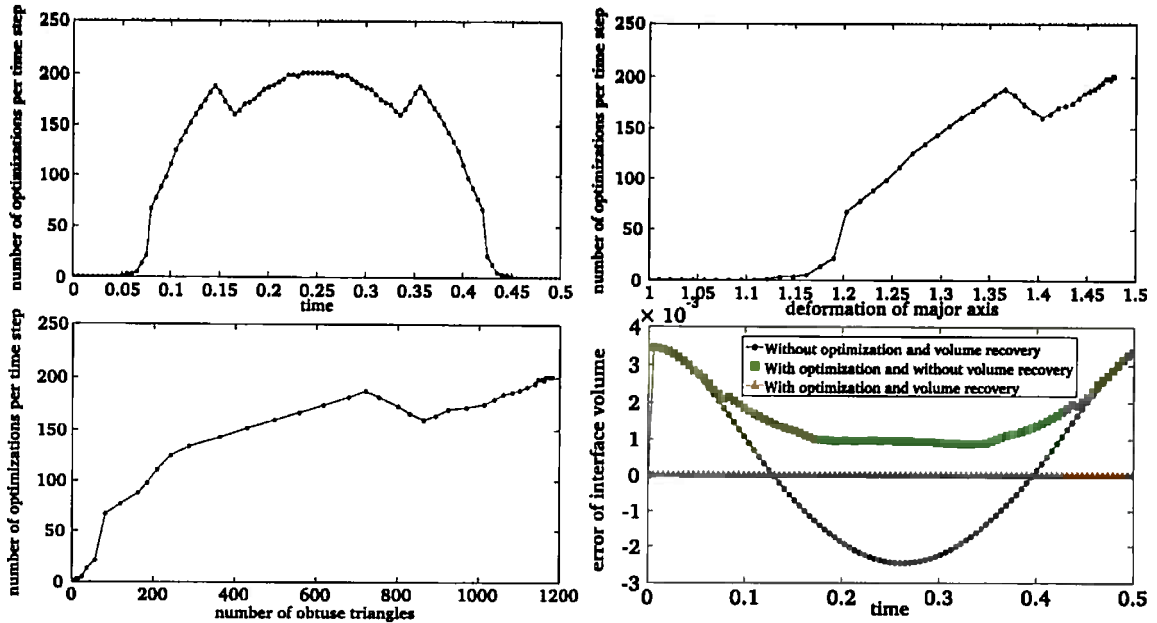
**Tabela 4.14:** Ângulo ( $\angle$ ), qualidade ( $Q$  and  $\iota$ ) e desvio padrão correspondente ( $std$ ) para  $t = T/2$  : com otimização (coluna B), com otimização e correção de volume (coluna C). Na última linha os tempo são relativos ao tempo despendido quando otimização e correção de malha não foram aplicadas (coluna A).

### Maximun Angle



**Figura 4.6:** A interface para  $t = T/2$  de uma interface esférica num escoamento periódico reversível sem (esquerda) e com (direita) otimização.





**Figura 4.7:** *Escoamento periódico reversível com otimização lagrangiana e correção de volume para  $t \in [0, 0.5]$ . Número de chamadas do algoritmo de otimização por passo no tempo em função: do tempo (acima na esquerda), da deformação (acima na direita), do número de triângulos obtusângulos (abaixo na esquerda). Erro no volume em função do tempo (abaixo na direita).*

a correção de volume é ativada o volume é conservado com precisão de máquina. Note que apesar da área da interface crescer enquanto ela deforma não há mudanças na topologia da malha lagrangiana, isto é, triângulos/arestas não são criados ou destruídos na implementação da metodologia atual. Em toda a simulação 11403 chamadas do algoritmo de otimização foram realizadas em 100 passos de integração para  $t \in [0, T]$ .

## 4.6 Custo computacional

Um caso típico de escoamento bifásico na presença de um surfactante insolúvel com os parâmetros utilizados na Seção 5.1,  $Ca_0 = 0.076491$ ,  $\beta = 0.8$  e  $\lambda = 3.335$  é considerado para estimar o custo computacional da presente metodologia. A Tabela 4.15 mostra que é muito vantajoso o emprego da técnica AMR para o refinamento da malha euleriana. A simulação foi realizada numa malha composta com cinco níveis de refinamento, comparada com uma malha uniforme e outras malhas compostas, todas elas com a mesma resolução no nível mais fino, revela que o tempo relativo com o uso do AMR é cerca 52 vezes menor e emprega em torno de 460 vezes menos células computacionais do que uma malha uniforme com a mesma resolução do nível mais fino. Uma observação importante é que o custo computacional para a troca dinâmica de malha é desprezível comparado com o tempo de simulação, cerca de  $4.0 \times 10^{-3}\%$  do tempo total gasto para atingir o estado estacionário. Para o caso teste usado, a malha composta trocou 20 vezes em 18000 passos de integração.

O algoritmo de otimização de malha lagrangiana é aplicado para garantir a qualidade mínima dos triângulos para que o esquema de volumes finitos seja empregado, impondo o valor  $88.28^\circ$  para o ângulo máximo de cada um dos triângulos da malha e qualidade do triângulo  $Q_k$  (veja Seção 4.5) maior ou igual a 0.95 para todo passo no tempo. Essa abordagem tomou 5.7% do tempo total necessário para alcançar o estado estacionário, com um máximo de 4 otimizações por passo no tempo e um número total de 832 otimizações. O tempo gasto com uma otimização é em torno de 30% maior que o tempo de um passo no tempo sem otimização. O custo total da otimização lagrangiana depende do número de otimizações empregadas num passo no tempo, o que depende de quanto e

number of levels	Eulerian cells	memory usage	time spent
uniform mesh	462.332	18.15	52.45
2	60.86	3.15	4.65
3	8.85	1.29	1.67
4	1.91	1.11	1.33
5	1.00	1.00	1.00

**Tabela 4.15:** *Células eulerianas empregadas, quantidade de memória usada e tempo gasto em um passo no tempo em diversas malhas relativo ao tempo para a computação com uma malha composta com cinco níveis de refinamento.*

como a interface deforma. Nesse exemplo a interface lagrangiana se deforma aproximadamente 28% (18%) no seu eixo maior (menor). A otimização é composta de muitas operações que permitem uma implementação em paralelo que serão exploradas no futuro.

## Capítulo 5

# Resultados: validações

O presente capítulo inicia-se com a simulação computacional de uma gotícula num escoamento cisalhante simples em duas situações: quando recoberta por um elemento surfactante insolúvel e quando limpa (Seção 5.1). Os resultados são comparados com resultados experimentais e com outras simulações prévias da literatura. Na Seção 5.2, a dinâmica de uma gotícula de ferrofluido em equilíbrio sob a ação de um campo magnético uniforme é simulada e o campo magnético calculado no interior da gotícula é comparado com a solução analítica do problema, conhecida neste caso.

### 5.1 Gotícula newtoniana num escoamento cisalhante

A deformação e a orientação de uma gotícula, quando limpa e na presença de um surfactante insolúvel, é estudada num escoamento cisalhante simples dado por

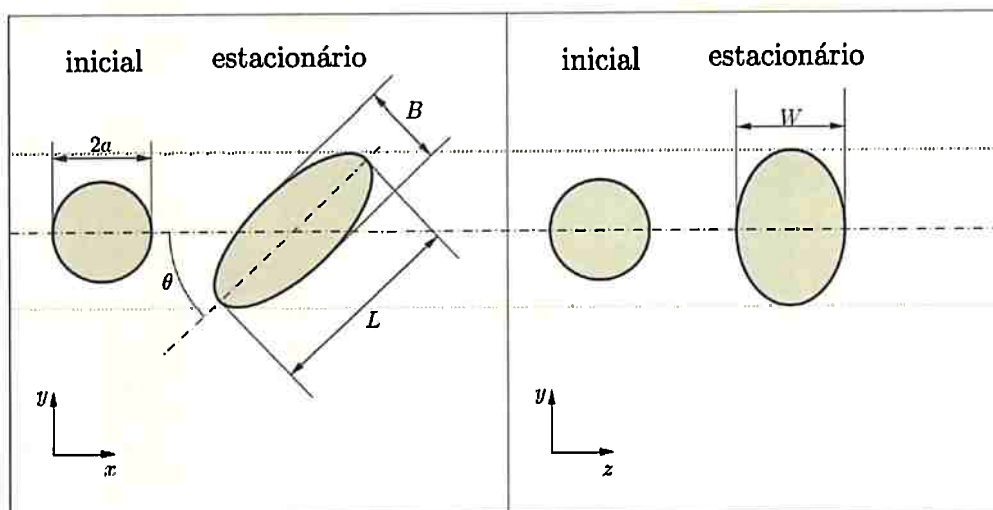
$$\mathbf{u} = (\dot{\gamma}y, 0, 0), \quad -1.1520 \times 10^{-2}m \leq y \leq 1.1520 \times 10^{-2}m,$$

onde  $\dot{\gamma} = \partial u_x / \partial y$  é a razão de cisalhamento característico. As simulações computacionais são realizadas até que a gota alcance um formato elipsoidal (ou quase elipsoidal) num estado estacionário. Os resultados são então comparados a dados experimentais e numéricos (Feigl *et al.*, 2007) pela observação dos comprimentos do maior (menor) eixo no plano  $xy$ ,  $L$  ( $B$ ), da dimensão da gota na direção  $z$ ,  $W$ , e pelo ângulo de orientação  $\theta$  (Figura 5.1). Se  $\rho_d$  e  $\eta_d$  são a densidade e a viscosidade da gotícula,  $D_s$  é o coeficiente de difusão superficial do surfactante,  $\rho_c$  e  $\eta_c$  são a densidade e a viscosidade do fluido, então os adimensionais considerados para esse problema são a razão de viscosidade  $\lambda = \eta_d / \eta_c$ , o número de capilaridade  $Ca_0 = a\eta_c\dot{\gamma} / \sigma_0$ , na qual  $\sigma_0$  é o coeficiente de tensão superficial da interface limpa (sem surfactante), o parâmetro  $\zeta = (a\sigma_0) / (\eta_c D_s) = Pe_s / Ca_0$ , no qual  $Pe_s = a^2\dot{\gamma} / D_s$  é o número de Péclet,  $\beta$  é um parâmetro de influência do surfactante, comumente chamado número de elasticidade, ( $\beta$  é parte da relação (2.14), que descreve o modelo linear de Langmuir (Pozrikidis, 2011)).

O domínio computacional é um cubo de aresta  $[-1.1520 \times 10^{-2} m, 1.1520 \times 10^{-2} m]$ , o qual é discretizado por uma malha composta por cinco níveis de refinamento, cujo nível mais fino de refinamento tem a resolução de  $h = \Delta x = \Delta y = \Delta z = 9.0 \times 10^{-5} m$  (para mais informações da malha utilizada veja a Seção 4.6). A gotícula esférica de raio  $a = 4.8828 \times 10^{-4} m$ , aproximada por 5120 triângulos (com comprimento médio de arestas igual a  $h_l = 3.6865 \times 10^{-5} m$  e desvio padrão de  $2.3965 \times 10^{-6} m$ ), é colocada no centro do domínio computacional. Note que a razão das malhas eulerianas e lagrangianas é  $h/h_l = 2.4414$ .

Seguindo o aparato experimental em Feigl *et al.* (2007), os parâmetros físicos adotados foram  $\rho_c = \rho_d = 1.0300 \times 10^3 kg/m^3$ ,  $\sigma_0 = 3.1200 \times 10^{-2} N/m$ ,  $\eta_c = 4.0000 \times 10^{-1} N.s/m^2$  e  $\eta_d = \lambda\eta_c$ .

A simulação inicia com uma concentração de surfactante uniformemente distribuída sobre a interface de separação de fluidos ( $\Gamma \equiv 1$ ). O grupo de adimensionais necessários para a realização de uma simulação específica são o número de capilaridade  $Ca_0$ , a razão de viscosidade  $\lambda$ , a taxa cisalhamento  $\dot{\gamma}$ , além dos parâmetros associados ao surfactante  $\beta$  e  $\zeta$ . Dado que as viscosidades



**Figura 5.1:** À esquerda, seção transversal paralela ao plano  $xy$  e à direita seção transversal paralela ao plano  $yz$  de uma gotícula num escoamento cisalhante simples:  $a$  é o raio da gota não deformada,  $L$  é o eixo maior,  $B$  é o eixo menor,  $\theta$  é o ângulo de inclinação e  $W$  é a dimensão da interface na direção  $z$ .

do sistema, a tensão superficial, a velocidade do escoamento e o raio inicial da gotícula são todos conhecidos, temos então que os os três primeiros adimensionais estão determinados. O parâmetro  $\beta$  foi determinado por Feigl *et al.* (2007) utilizando dados experimentais e a equação linear de estado (2.14). Na simulação computacional a seguir,  $\beta = 0$  foi utilizado para simular uma interface livre de surfactante e  $\beta = 0.8$  para uma interface revestida por surfactante. Seguindo Feigl *et al.* (2007), o adimensional  $\zeta = 1$  foi adotado para os casos com  $\lambda = 3.3350$  e  $\lambda = 30$ .

As simulações são realizadas para duas razões de viscosidade,  $\lambda = 3.3350$  (Figura 5.2) e  $\lambda = 30$  (Figura 5.3), e os resultados são comparados para diversos números de capilaridade. Os símbolos vermelhos representam os resultados do presente trabalho, os símbolos em preto fazem referência aos dados experimentais, enquanto que os símbolos brancos são resultados numéricos de Feigl *et al.* (2007), os quais são obtidos pelo método da integral de contorno (*boundary integral method*) em conjunto a um esquema de Runge-Kutta de segunda ordem para evolução da interface e um método de elementos finitos para a concentração de surfactante.

A Figura 5.2 mostra que para uma razão de viscosidade de  $\lambda = 3.335$  a presença de surfactante tem grande efeito na geometria da gotícula. As gotículas revestidas por surfactante tornam-se mais alongadas na direção de seus eixos maiores, consideravelmente mais estreitas ao longo de seus eixos menores, mais orientadas com a direção do escoamento quando  $Ca_0$  cresce, quando comparadas com as de interface limpa. Para os casos estudados, em gotículas com surfactante, o ângulo de inclinação varia entre 0.3023 e 0.6005 enquanto que a deformação do eixo maior está entre 11.5% e 45.0%, do eixo menor entre a mínima de 9.0% e a máxima de 22.6% e, na dimensão da gotícula na direção  $z$  ( $W$ ), entre 1.0% e 9.2%. Para gotículas limpas, o ângulo de inclinação varia entre 0.6167 e 0.7623 enquanto que a deformação do eixo maior está entre 2.2% e 9.7%, do eixo menor entre a mínima de 2.0% e a máxima de 7.8% e na dimensão da gotícula na direção  $z$  ( $W$ ) entre 0.0% e 0.7%. Uma boa concordância foi encontrada entre os resultados obtidos no presente trabalho e os resultados experimentais e numéricos prévios, reportados por Feigl *et al.* (2007).

Para uma razão de viscosidade de  $\lambda = 30$ , a Figura 5.3 mostra que a presença de surfactante tem um efeito menor na geometria da gotícula quando comparada com os casos de  $\lambda = 3.3350$  à medida que  $Ca_0$  cresce. Neste caso, todas as gotículas tiveram uma pequena deformação (deformaram menos do que 6%). Para valores pequenos de  $Ca_0$  (entre 0.00 e 0.06), gotículas revestidas com surfactante quando comparadas com gotículas limpas tiveram uma maior deformação e tornaram-

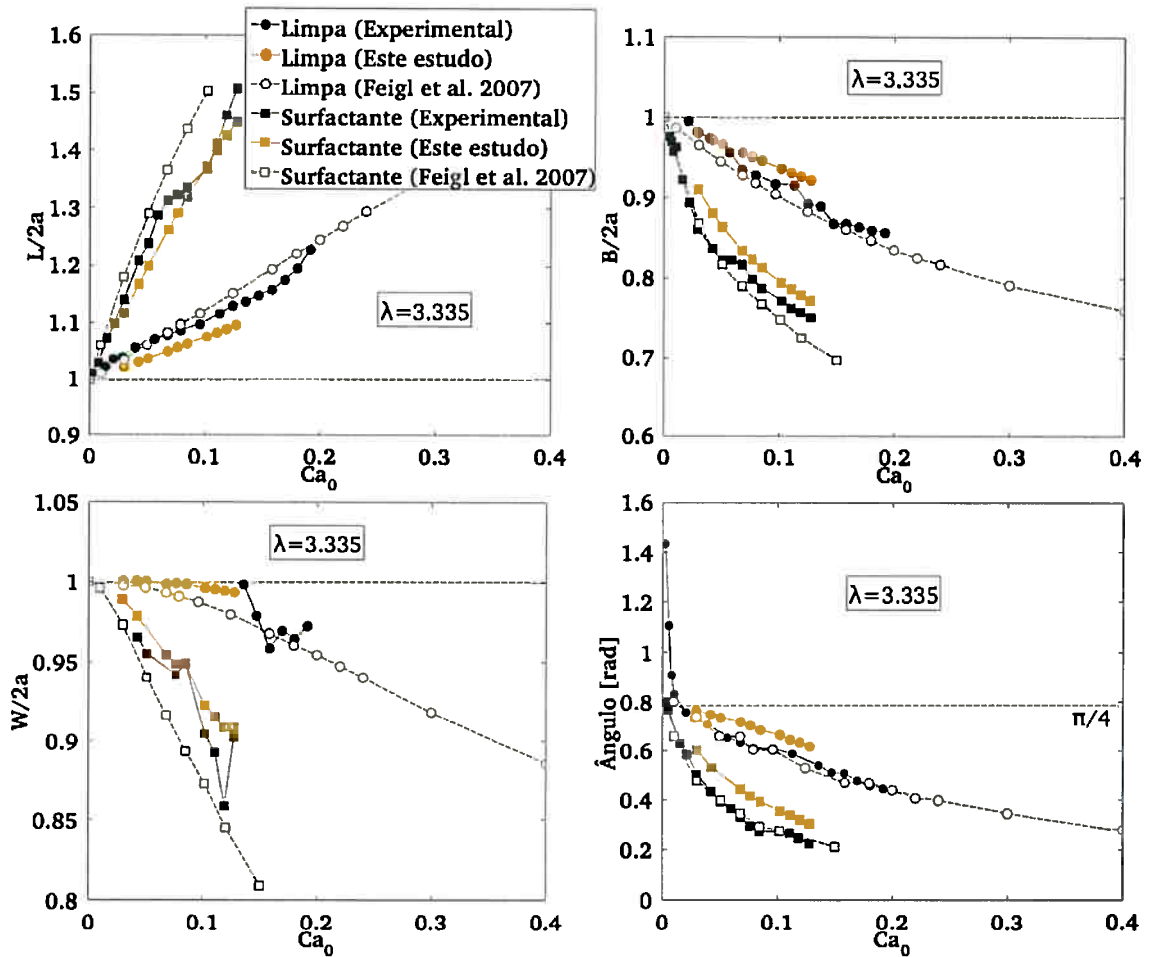


Figura 5.2: Comparação entre resultados experimentais e computacionais (presente trabalho e Feigl et al. (2007)) para os valores:  $\zeta = 1$ ,  $\beta = 0.0$  (interface limpa),  $\beta = 0.80$  (interface com surfactante) e razão de viscosidade de  $\lambda = 3.335$ .

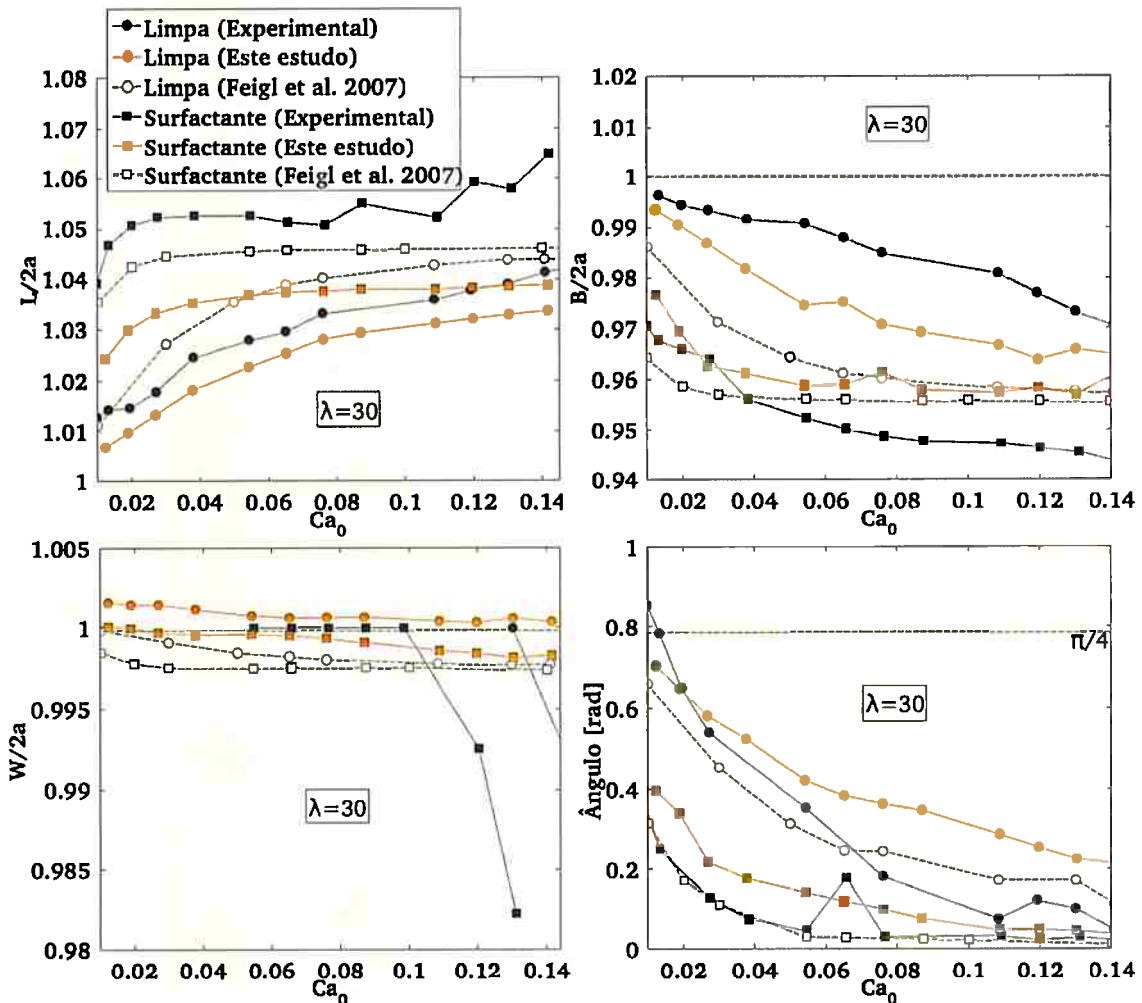


Figura 5.3: Comparação entre resultados experimentais e computacionais (presente trabalho e Feigl et al. (2007)) para os valores:  $\zeta = 1$ ,  $\beta = 0.0$  (interface limpa),  $\beta = 0.80$  (interface com surfactante) e razão de viscosidade  $\lambda = 30$ .

se mais orientadas na direção do escoamento. Mais uma vez, os resultados estão em concordância com resultados experimentais e numéricos prévios obtidos por Feigl et al. (2007).

É interessante destacar que gotículas com maior deformação têm razão de viscosidade de  $\lambda = 3.335$  enquanto que as gotículas com  $\lambda = 30$  encontram-se mais orientadas na direção do escoamento no estado estacionário.

Num outro teste de validação, os valores mínimos e máximos da concentração de surfactante no estado estacionário foram comparados aos resultados numéricos obtidos por Li e Pozrikidis (1997) e por Feigl et al. (2007) para uma gotícula num escoamento cisalhante simples caracterizado por  $\zeta = 10$ ,  $\beta = 0.1$ , e razão de viscosidade fixada em  $\lambda = 1$ . A Figura 5.4 mostra os valores mínimos e máximos da concentração de surfactante como uma função do número de capilaridade de equilíbrio  $Ca^* = Ca_0/(1 - \beta)$ . Uma boa concordância foi encontrada.

## 5.2 Gotícula de ferrofluido num campo magnético uniforme

Nesta seção, uma gotícula de ferrofluido em equilíbrio e inicialmente esférica suspensa num fluido viscoso em repouso e não magnetizável é simulada pelo modelo desenvolvido no presente trabalho



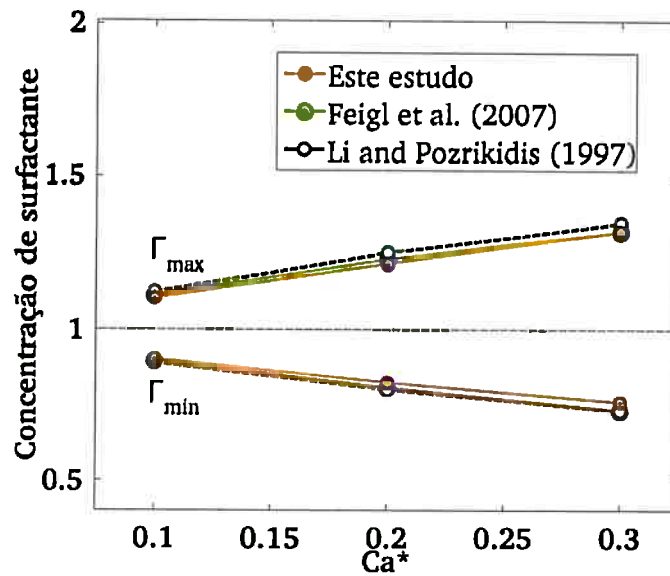


Figura 5.4: Resultados de simulações em um escoamento cisalhante simples comparados com as estimativas numéricas de Li e Pozrikidis (1997) e Feigl et al. (2007) para  $\lambda = 1$ ,  $\zeta = 10$  e  $\beta = 0.1$ .

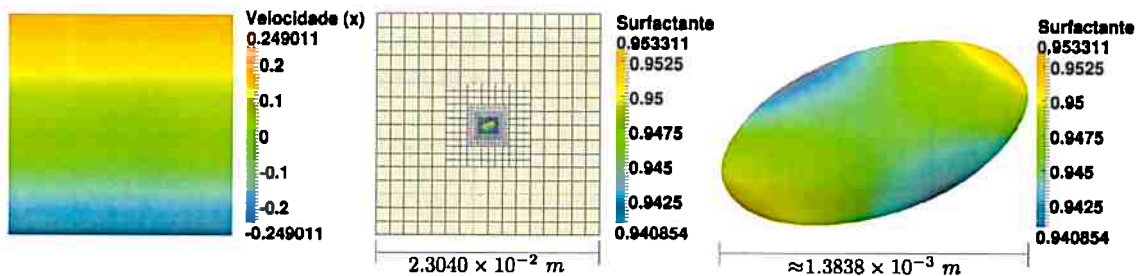


Figura 5.5: À esquerda, campo de velocidades em  $m \cdot s^{-1}$  na direção  $x$  em plano de corte paralelo ao plano  $xy$ . Ao centro, gotícula imersa no domínio computacional, destacando-se os cinco níveis de refinamento da malha composta. À direita, detalhe da interface mostrando a distribuição de surfactante no estado estacionário. Parâmetros empregados: razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , número de capilaridade  $Ca_0 = 0.127351$  com a presença de um surfactante insolúvel ( $\beta = 0.8$ ). Na direita temos uma seção transversal paralela ao plano  $xy$ , na qual está representado o campo de velocidades na direção  $x$ . No centro temos a mesma seção destacando os cinco níveis de refinamento utilizados nessa simulação, com uma pequena interface imersa ao centro. Na esquerda é apresentada uma ampliação da interface que mostra a distribuição de surfactante sobre a superfície no estado estacionário. Tais resultados são resultados de uma simulação de escoamento bifásico com razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , para um número de  $Ca_0 = 0.127351$  com a presença de um surfactante insolúvel ( $\beta = 0.8$ ).

(Seção 2.3.2) quando submetida à ação de um campo magnético uniforme externo  $\mathbf{H}_0$ . As fases desse escoamento, gotícula e fluido ao redor, são consideradas não condutoras e isentas de cargas livres. Nessas condições, a força magnética na vizinhança da interface das fases é induzida somente pela diferença de permeabilidade magnética das duas fases (Afkhami *et al.*, 2010).

A gotícula sob ação da força magnética deforma-se e alonga-se na direção do campo magnético imposto ao mesmo tempo que um campo magnético é induzido em seu interior cuja intensidade,  $H_d$ , é uma função do campo magnetizante  $\mathbf{H}_0$  e da suscetibilidade magnética, dentre outros fatores. No que segue, o valor estacionário de  $H_d$  calculado via simulação computacional é comparado com aquele no interior de um elipsóide fornecido por uma expressão analítica. Como em Afkhami *et al.* (2010), a deformação de uma gotícula de ferrofluido inicialmente em equilíbrio sob a ação de um campo magnético uniforme é assumida axissimétrica e a gotícula no estado estacionário é considerada um elipsóide prolato, isto é,  $B = W$  (Figura 5.1). Para uma gotícula nessa geometria contendo partículas superparamagnéticas (comportamento descrito na Seção 2.3.2) existe disponível na literatura uma expressão analítica que descreve a magnitude do campo magnético,  $H_{analitica}$ , no interior da gotícula dada por (Afkhami *et al.*, 2010; Kaufman *et al.*, 2008; Landau e Lifshitz, 1984)

$$H_{analitica} = \frac{\mu_c H_0}{(1 - \Xi)\mu_c + \Xi\mu_d}, \quad (5.1)$$

na qual,  $\mu_c$  e  $\mu_d$  são respectivamente a permeabilidade magnética da fase contínua e da fase dispersa,  $\Xi$  é o fator de desmagnetização calculado por

$$\Xi = \left( \frac{1 - E^2}{2E^3} \right) \left( \ln \frac{1 + E}{1 - E} - 2E \right),$$

onde  $E (= \sqrt{1 - B^2/L^2})$  é a excentricidade,  $B$  o comprimento do eixo menor e  $L$  o comprimento do eixo maior (localizado na direção do campo magnético imposto  $\mathbf{H}_0$ ). Uma simulação computacional baseada em resultados experimentais e numéricos obtidos por Afkhami *et al.* (2010) para uma gotícula de ferrofluido de raio  $a = 1.2910 \times 10^{-3} \text{ m}$  imersa em glicerol sob a ação de um campo magnético uniforme externo é apresentada a seguir.

O grupo de adimensionais relevantes para a simulação computacional do problema considerado são o número de Bond (ou Eotvos) magnético  $Bo_m = (\mu_0 H_0^2)/(\sigma_0 a^{-1})$  e a suscetibilidade magnética  $\chi$  que indica o grau de magnetização do material, isto é,  $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$  (para o caso estudado neste trabalho), onde  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética no vácuo,  $H_0$  é a magnitude do campo magnético uniforme imposto,  $\sigma_0$  é o coeficiente de tensão superficial da interface,  $\mathbf{M}$  representa o vetor magnetização e  $\mathbf{H}$  o campo magnético.

O domínio computacional é um cubo centrado em  $(0, 0, 0)$  com arestas de comprimento  $[-2.816 \times 10^{-2} \text{ m}, 2.816 \times 10^{-2} \text{ m}]$  discretizado por uma malha composta de cinco níveis de refinamento. O nível mais fino tem a resolução de  $h = \Delta x = \Delta y = \Delta z = 1.1 \times 10^{-4} \text{ m}$ . A gotícula, inicialmente esférica de raio  $a = 1.291 \times 10^{-3} \text{ m}$ , é aproximada por 20480 triângulos (com comprimento médio de arestas igual a  $h_t = 4.8756 \times 10^{-5} \text{ m}$  e desvio padrão de  $3.1702 \times 10^{-6} \text{ m}$ ), é colocada no centro do domínio computacional. Note que a razão das malhas eulerianas e lagrangianas é  $h/h_t = 2.2561$ .

Seguindo o aparato experimental descrito em Afkhami *et al.* (2010), os parâmetros físicos adotados foram  $H_0 = 1.2167 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$ ,  $\rho_c = \rho_d = 1.26 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $\sigma_0 = 1.35 \times 10^{-2} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ ,  $\eta_c = \eta_d = 1.0 \times 10^{-1} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ,  $\chi = 0.8903$ ,  $\mu_c = \mu_0$  e  $\mu_d = \mu_0(1 + \chi)$ , onde  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{A}^{-1}$ ,  $\rho_c$  e  $\eta_c$  são a densidade e a viscosidade da gotícula de ferrofluido,  $\rho_c$  e  $\eta_c$  são a densidade e a viscosidade do glicerol.

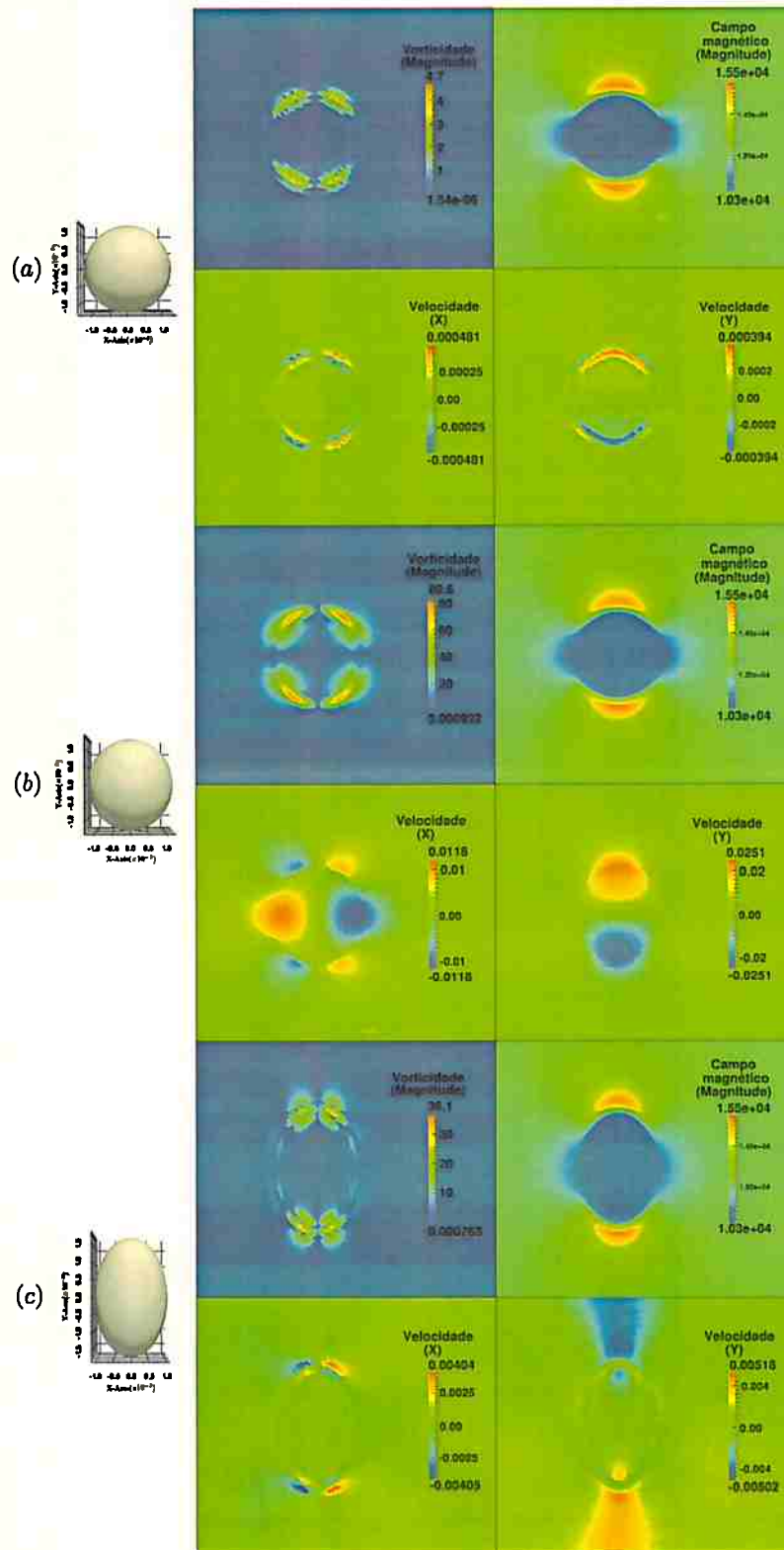
O campo magnético no domínio,  $\mathbf{H}$ , é calculado como descrito na Seção 2.3.2 empregando-se condição de fronteira Neumann na direção  $y$  (determinada pelo campo  $H_0$  imposto nesta direção) e condições de contorno periódicas em  $x$  e  $z$  para 2.21. Para o escoamento tomamos condições de Dirichlet para a velocidade (considerando a fronteira em repouso) e condições de Neumann homogênea para a correção de pressão (Seção 2.1).

As figuras 5.6 e 5.7 apresentam a interface que representa a gotícula de ferrofluido, o campo

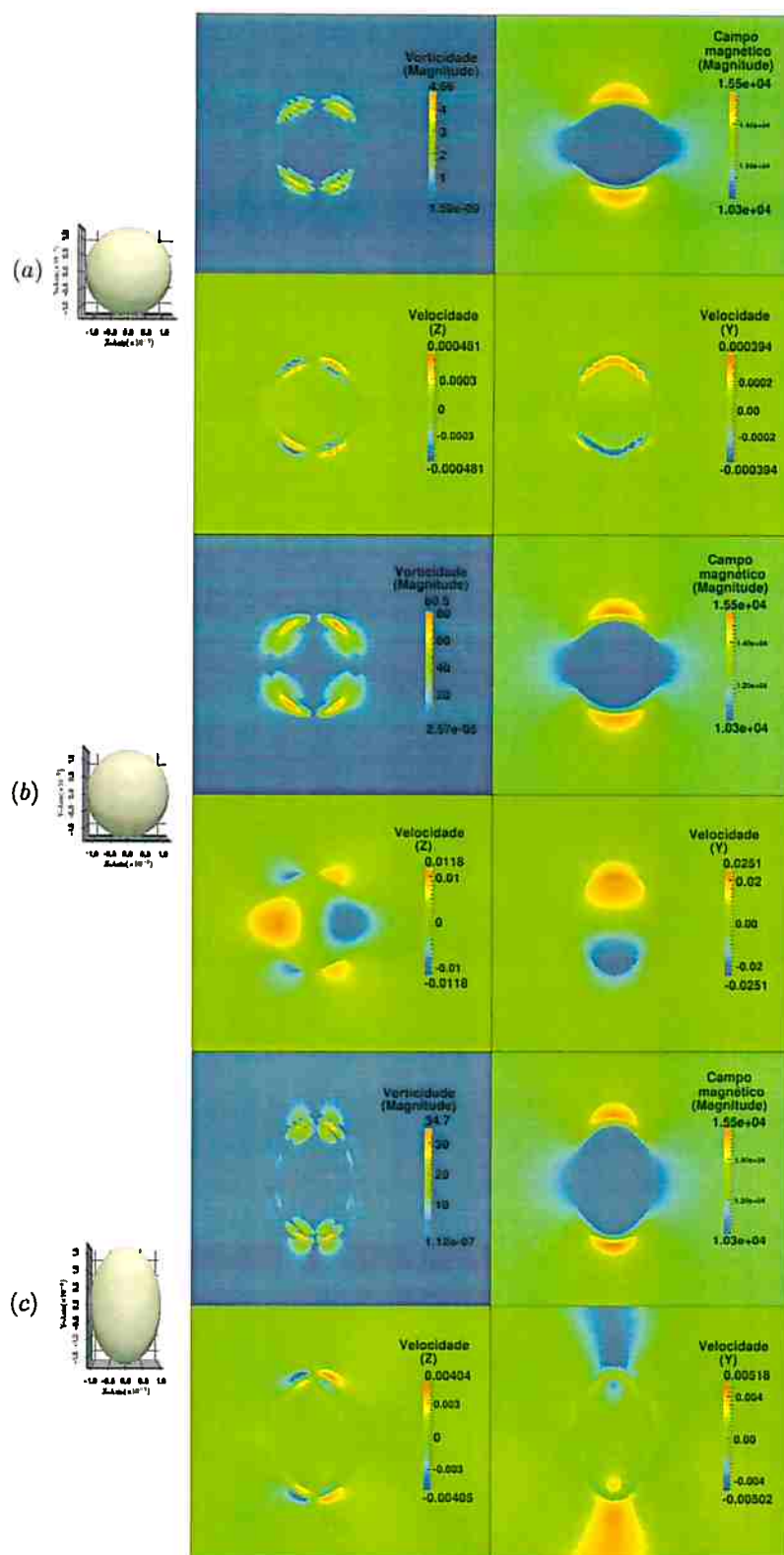
de vorticidade, a magnitude do campo magnético e as componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  da velocidade do escoamento na vizinhança da gotícula para seções transversais paralelas aos planos  $xy$  e  $yz$ . Ao fim do primeiro passo temporal de integração, tem-se os resultados das figuras 5.6(a) e 5.7(a); após 100 passos de integração temporal ( $t \approx 4.586 \times 10^{-1}$ ), tem-se os resultados das figuras 5.6(b) e 5.7(b); no estado estacionário,  $t \geq 2.021 \times 10^1$ , tem-se os resultados mostrados pelas figuras 5.6(c) e 5.7(c).

Por intermédio das figuras 5.6 e 5.7 é possível acompanhar a evolução radialmente simétrica em torno do eixo  $y$  da interface, da vorticidade, do campo magnético e da velocidade. Por um lado, a interface alonga-se na direção  $y$  (direção do campo imposto) e a componente da velocidade do escoamento nessa direção indica que o fluido desloca-se do centro da gotícula para as extremidades como ilustrado na parte inferior direita das figuras 5.6(b) e 5.7(b). Por outro lado, a interface torna-se mais estreita nas direções  $x$ ,  $z$  e a componente da velocidade em cada uma dessas direções indica que o fluido se desloca das extremidades para o centro como ilustra a parte inferior esquerda das figuras 5.6(b) e 5.7(b). Nesses instantes a vorticidade concentra-se na vizinhança da interface da gotícula apresentando maiores valores de magnitude nas extremidades na direção  $y$  e o campo magnético está presente em todo o domínio com menores valores de magnitude no interior da gotícula e maiores nas regiões externas à interface nas extremidades na direção  $y$  e em regiões distantes da interface a magnitude assume o valor do campo magnético imposto  $H_0$ . As figuras 5.6(c) e 5.7(c) mostram o estado estacionário da simulação com a interface tendo atingido um formato aproximado de um elipsóide prolato com razão de deformação  $B/L = 6.0397 \times 10^{-1}$ .

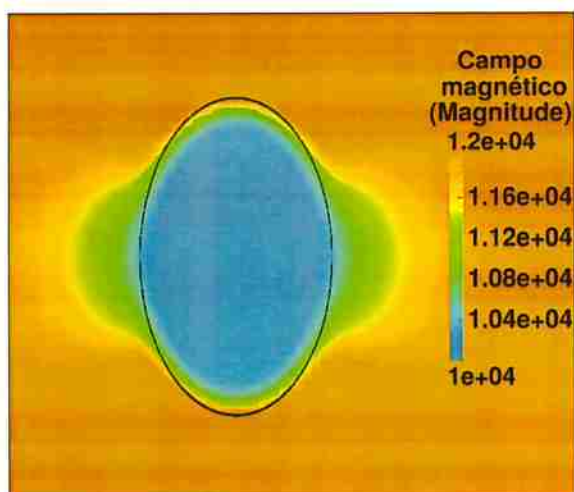
Os parâmetros da simulação são aplicados na expressão 5.1, usada no cálculo do valor analítico da magnitude do campo magnético no interior de uma gotícula de ferrofluido no formato de um elipsóide prolato, resultando numa magnitude igual a  $H_{analítica} = 1.0240 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  assumida constante no interior da gotícula. Esse valor pode ser comparado com a magnitude do campo magnético, variável, no interior da gotícula estimado pela presente simulação e representado na Figura 5.8 cujos valores estão aproximadamente entre  $1.0100 \times 10^4$  e  $1.0350 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  no núcleo, com valores extremos diferenciando-se do valor analítico em  $-1.54\%$  e  $1.44\%$ , respectivamente. Nas extremidades na direção  $y$ , em pequenas faixas, a magnitude do campo magnético varia entre  $1.0800 \times 10^4$  e  $1.1600 \times 10^4 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  chegando a valores próximos a  $1.4000 \times 10^4$  na região de interface. Para o caso estudado, a simulação computacional mostrou-se capaz de estimar uma faixa de magnitude de campo magnético que contém a solução analítica exibindo uma diferença máxima para esse de  $1.54\%$  no núcleo da gotícula.



**Figura 5.6:** Formato da gotícula, campo de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), velocidade na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e velocidade na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação realizada nesta seção: (a) do primeiro passo de integração, (b) do passo de integração de número 100 e (c) do estado estacionário.



**Figura 5.7:** Formato da gotícula, campo de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), velocidade na direção z (abaixo na esquerda) e velocidade na direção y (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano yz resultantes da simulação realizada nesta seção: (a) do primeiro passo de integração, (b) do passo de integração de número 100 e (c) do estado estacionário.



**Figura 5.8:** Campo magnético ( $A \cdot m^{-1}$ ) do plano de corte paralelo ao plano  $xy$  passando pela origem estimado por uma simulação com  $Bo_m = 17.8$  e  $\chi = 0.8903$  para o interior de uma gotícula de ferrofluido no estado de equilíbrio.



# Capítulo 6

## Resultados: aplicações

Neste capítulo a metodologia numérica desenvolvida no presente trabalho é aplicada ao estudo de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante na presença de um campo magnético externo. Esse estudo se concentra nos efeitos da magnitude de campo magnético e de surfactante sobre a geometria e orientação da gotícula. Tais estudos são inéditos na literatura de ferrofluido e pretendem contribuir para ampliar e desenvolver os estudos de manipulação de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético externo.

Na Seção 6.1 o efeito da magnitude do campo magnético externo nas deformações e orientação de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante é estudado, para duas razões de viscosidade  $\lambda = 3.335$  e  $\lambda = 30$  e diversos números de capilaridade. A seguir na Seção 6.2 determina-se o tamanho do domínio para uma aplicação com ferrofluido, baseado na influência do tamanho exercida nas deformações dos parâmetros geométricos da gotícula e na orientação. Outros fatores considerados são o número de células eulerianas utilizadas, o tempo computacional e o número de passo para o estado estacionário. A resolução dos domínios euleriano e lagrangiano é determinada na Seção 6.3, baseada na influência nas deformações dos parâmetros geométricos de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante, na razão entre as resoluções de malha eulerianas e lagrangiana, no número mínimo de células computacionais no interior de uma gotícula e no custo computacional. Usando o domínio e a resolução determinados nas seções anteriores a Seção 6.4 estuda os efeitos dos tipos de fases, da presença de surfactante e da influência de um campo magnético uniforme externo (quando uma das fases é um ferrofluido) sobre a deformação, orientação e vorticidade num escoamento cisalhante. O potencial do modelo como ferramenta de estudo de gotas de ferrofluido é ilustrado com alguns exemplos de análise.

### 6.1 Gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante

Nesta seção a deformação e a orientação de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante simples sob a ação de um campo magnético externo é estudada. Visando comparar o comportamento de uma gotícula de ferrofluido com uma gotícula newtoniana limpa o domínio computacional, a discretização da gotícula e parte do grupo de adimensionais utilizados são os mesmos da validação descrita na Seção 5.1. Os adimensionais comuns ao da Seção 5.1 são o número de capilaridade  $Ca_0$ , a razão de viscosidade  $\lambda$  e a taxa cisalhamento  $\dot{\gamma}$ , outros necessários para a realização de uma simulação específica com ferrofluido são o número de Bond magnético (ou Eotvos)  $Bo_m$  e a suscetibilidade magnética  $\chi$ . Dado que as viscosidades do sistema, a tensão superficial, a velocidade do escoamento (obtida pela taxa de cisalhamento), o raio inicial da gotícula, a permeabilidade magnética no vácuo  $\mu_0$  e o campo magnético imposto  $H_0$  são todos conhecidos então os quatro primeiros adimensionais estão determinados. Os campos magnéticos e a suscetibilidade  $\chi = 8.9030 \times 10^{-1}$  utilizada foram baseados em dados experimentais com gotas de ferrofluido realizados por Afkhami *et al.* (2010).

O estudo é realizado pela observação dos comprimentos do maior (menor) eixo no plano  $xy$   $L$  ( $B$ ), da razão de deformação de Taylor  $D = (L - B)/(L + B)$ , da dimensão da gota na direção

$z$   $W$  e pelo ângulo de orientação  $\theta$  (Figura 5.1) para diferentes valores de capilaridade e campo magnético.

Os parâmetros físicos adotados foram  $\rho_c = \rho_d = 1.03 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,  $\sigma_0 = 3.12 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ ,  $\eta_c = 4.0 \times 10^{-1} \text{ N.s/m}^2$ ,  $\eta_d = \lambda \eta_c$ ,  $\mu_c = \mu_0$  e  $\mu_d = \mu_0(1 + \chi)$ , na qual  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-1}$ .

O estudo dos efeitos de um campo magnético na geometria de uma gota de ferrofluido submetida a um escoamento cisalhante simples é realizado para duas razões de viscosidade  $\lambda = 3.3350$  (Figuras 6.1, 6.2(a)-(b) e 6.4(a)) e  $\lambda = 30$  (Figuras 6.3 e 6.4(b)), e os resultados são comparados para diferentes campos magnéticos ( $H_0 = 0.0, 6.7640 \times 10^3$  e  $1.2167 \times 10^4 \text{ A m}^{-1}$ ) e diversos números de capilaridade.

Alguns dos efeitos causados por um campo magnético uniforme na geometria e orientação de uma gotícula de ferrofluido nos casos estudados para uma razão de viscosidade de  $\lambda = 3.335$  estão ilustrados nas Figuras 6.1 e 6.4(a) pelas alterações ocorridas devido ao aumento da magnitude do campo magnético tornando a gotícula: mais alongada na direção de seu eixo maior  $L$  (veja uma ampliação da Figura 6.1 para o eixo maior na Figura 6.2(a)) com a diferença de deformação variando de 1.26% a 3.73%, consideravelmente mais estreita ao longo de seu eixo  $W$  na direção  $z$  numa faixa de 1.6% a 2.5%, menos orientadas na direção do escoamento (principalmente para os menores valores de capilaridade estudados), mais alongada ou mais estreita na direção de seu eixo menor  $B$  para faixas diferentes de número de capilaridade (veja uma ampliação da Figura 6.1 para o eixo menor na Figura 6.2(b)) com variação máxima de 0.4% e mais deformada segundo a deformação de Taylor como mostrado na Figura 6.4(a). Efeitos similares foram observados nos casos com razão de viscosidade de  $\lambda = 30$  com o aumento da magnitude do campo magnético a gotícula de ferrofluido tornou se: mais alongada de 0.26% a 0.46% na direção de seu eixo maior  $L$ , mais estreita na direção  $z$  com  $W$  variando de 0.45% a 0.54%, menos orientada com o escoamento principalmente para os menores números de capilaridade estudados, mais estreita na direção do eixo menor  $B$  numa taxa de 0.14% a 0.72% e mais deformada segundo a deformação de Taylor (Figura 6.4(b)).

A Figura 6.5 mostra o formato da gotícula, a vorticidade e a magnitude do campo magnético da seção transversal paralela ao plano  $xy$  para uma simulação com número de Bond magnético de  $Bo_m = 8.9772 \times 10^{-1}$ , razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$  e número de capilaridade  $Ca_0 = 0.5$  para o primeiro passo de integração em 6.5(a) e para o estado estacionário em 6.5(b).

## 6.2 Tamanho do domínio

Cinco casos distintos apenas pela dimensão do domínio foram simulados:  $C2.5a$ ,  $C05a$ ,  $C10a$ ,  $C20a$  e  $C40a$  visando analisar a influência do tamanho do domínio na geometria e orientação do estado estacionário de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante simples submetido a um campo magnético externo  $H_0$  com a aresta  $[-C; C]$  do domínio cúbico (Figura 6.6) e o número de níveis de refinamento AMR ( $n_{nr}$ ) descritos na Tabela 6.1, o nível mais fino de refinamento do domínio para todos os casos tem resolução  $h = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 1.0 \times 10^{-4} \text{ m}$ .

caso	$C$	$[-C; C]$	$n_{nr}$
$C2.5a$	$\approx 2.5a$	$[-3.20 \times 10^{-3}; 3.20 \times 10^{-3}]$	3
$C05a$	$\approx 05a$	$[-6.40 \times 10^{-3}; 6.40 \times 10^{-3}]$	4
$C10a$	$\approx 10a$	$[-1.28 \times 10^{-2}; 1.28 \times 10^{-2}]$	5
$C20a$	$\approx 20a$	$[-2.56 \times 10^{-2}; 2.56 \times 10^{-2}]$	6
$C40a$	$\approx 40a$	$[-5.12 \times 10^{-2}; 5.12 \times 10^{-2}]$	6

**Tabela 6.1:** Aresta  $[-C; C]$  do domínio cúbico e  $n_{nr}$ , o número de níveis de refinamento AMR, utilizados na avaliação de influência do tamanho do domínio no qual  $a = 1.2910 \times 10^{-3} \text{ m}$  é o raio da gotícula não deformada.

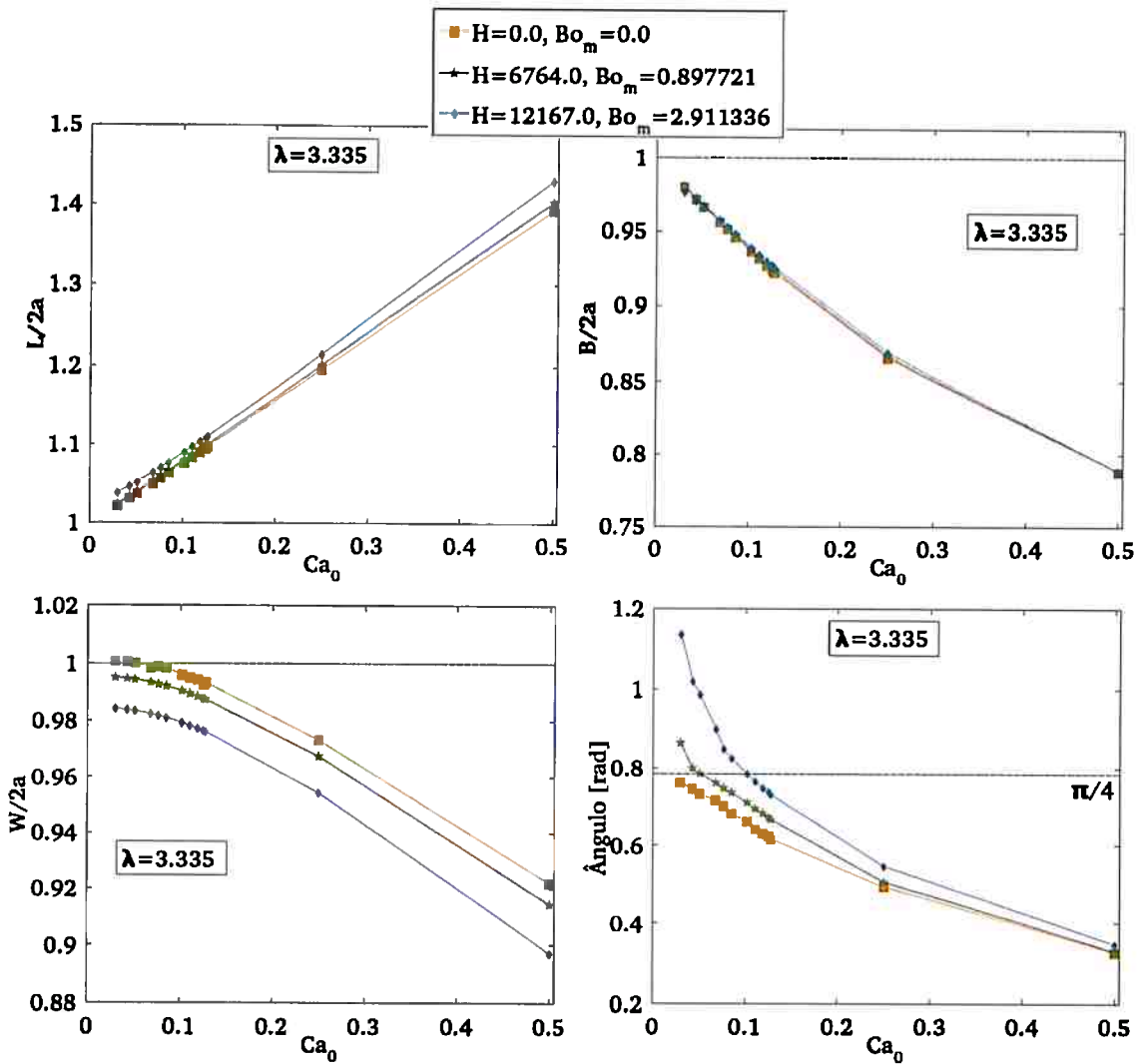


Figura 6.1: Comparação entre os parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores:  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$ ;  $\lambda = 0.335$  e  $\chi = 0.8903$ .

A gotícula esférica de raio  $a = 1.2910 \times 10^{-3} \text{ m}$ , aproximada por 20480 triângulos (com comprimento médio de arestas igual a  $h_l = 4.8756 \times 10^{-5} \text{ m}$  e desvio padrão de  $3.1702 \times 10^{-6} \text{ m}$ ), é colocada inicialmente no centro do domínio computacional. Note que a razão das malhas eulerianas e lagrangianas é  $h/h_l = 2.0510$  e que existem em média  $9.0130 \times 10^3$  células eulerianas no interior da gotícula.

Seguindo o aparato experimental em Afkhani *et al.* (2010) os parâmetros comuns a esses casos são listados na Tabela 6.2.

Dado que o objetivo dessa verificação é identificar a influência do tamanho do domínio na deformação e orientação da interface espera-se que os resultados do caso com o maior domínio ( $C40a$ ) sejam os que melhor representem as aproximações da modelagem proposta e por esse motivo serão os valores de referência para o estudo.

A Figura 6.7 apresenta a deformação dos parâmetros geométricos e orientação da gotícula em função do tempo adimensional  $\bar{t}$  (dado pelo tempo atual multiplicado pela razão de cisalhamento  $\dot{\gamma}$ ), essas informações são complementadas pelas Tabelas 6.3 e 6.4 com os valores de deformação

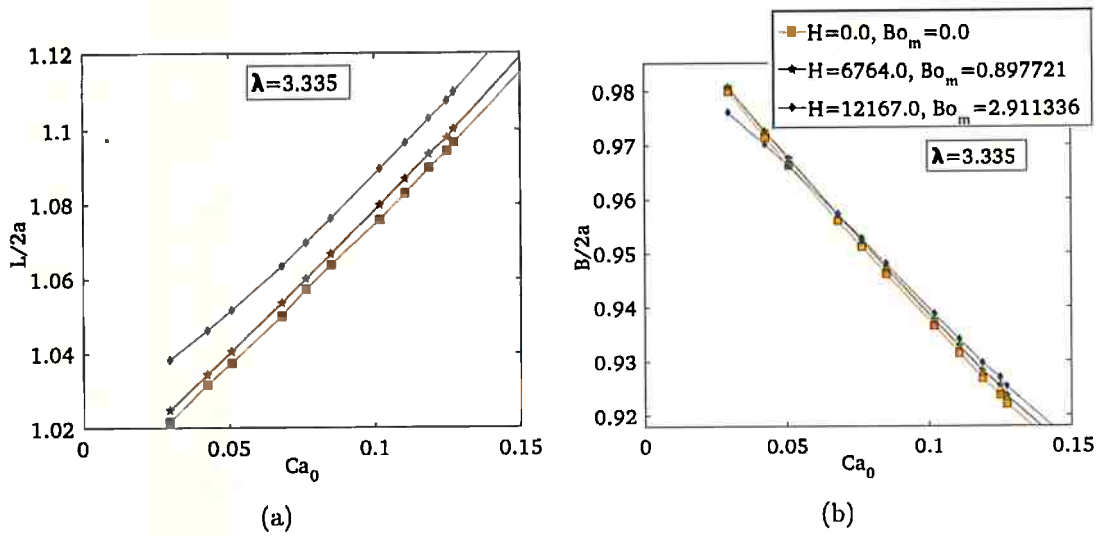


Figura 6.2: Comparação entre os comprimentos da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$ ;  $\lambda = 0.335$  e  $\chi = 0.8903$  na direção: (a) do eixo maior  $L$  e (b) do eixo menor  $B$ .

$H_0$ ( $A \cdot m^{-1}$ )	$1.2167 \times 10^4$
$Re$	$5.4900 \times 10^{-1}$
$a$ (m)	$1.2910 \times 10^{-3}$
$M_n$	$1.4053 \times 10^{-2}$
$\dot{\gamma}$	$2.6143 \times 10^1$
$\sigma_0$ ( $N \cdot m^{-1}$ )	$1.3500 \times 10^{-2}$
$Bo_m$	$1.7790 \times 10^1$
$Ca$	$2.5000 \times 10^{-1}$
$\lambda$	$1.5000 \times 10^0$
$\eta_c$ ( $N \cdot s \cdot m^{-2}$ )	$1.0000 \times 10^{-1}$
$\eta_d$ ( $N \cdot s \cdot m^{-2}$ )	$1.5000 \times 10^{-1}$
$\mu_0$ ( $N \cdot A^{-2}$ )	$1.2566 \times 10^{-6}$
$\rho_0$ ( $kg \cdot m^{-3}$ )	$1.2600 \times 10^3$
$\beta$	0
$\zeta$	-
$\chi$	$8.9030 \times 10^{-1}$

Tabela 6.2: Parâmetros das simulações utilizadas na avaliação de influência do tamanho do domínio.

e orientação média para o estado estacionário, o número de células eulerianas utilizadas (NCE), o número de passos de integração (NPEE) e o tempo médio em segundos de um passo de integração (TPPI). Pela Figura 6.7 e pelas Tabelas 6.3 e 6.4 é possível analisar: a deformação do maior eixo no

Caso	$L/2a$	$B/2a$	$W/2a$	Ângulo [rad]
C2.5a	1.5963	$7.5844 \times 10^{-1}$	$1.1649 \times 10^0$	$9.9424 \times 10^{-1} \pm 1.8636 \times 10^{-2}$
C05a	1.6239	$7.7316 \times 10^{-1}$	$7.7940 \times 10^{-1}$	$1.0309 \pm 3.7122 \times 10^{-2}$
C10a	1.6327	$7.6983 \times 10^{-1}$	$7.7876 \times 10^{-1}$	$1.0285 \pm 3.9262 \times 10^{-2}$
C20a	1.6331	$7.6922 \times 10^{-1}$	$7.7862 \times 10^{-1}$	$1.0295 \pm 3.9357 \times 10^{-2}$
C40a	1.6349	$7.6923 \times 10^{-1}$	$7.7735 \times 10^{-1}$	$1.0322 \pm 3.4167 \times 10^{-2}$

Tabela 6.3: Deformação e orientação da gotícula para o estado estacionário obtidos para a avaliação de influência do tamanho do domínio.

plano  $xy$ ,  $L$ , apresentando uma deformação média de referência para o estado estacionário de 63.49%

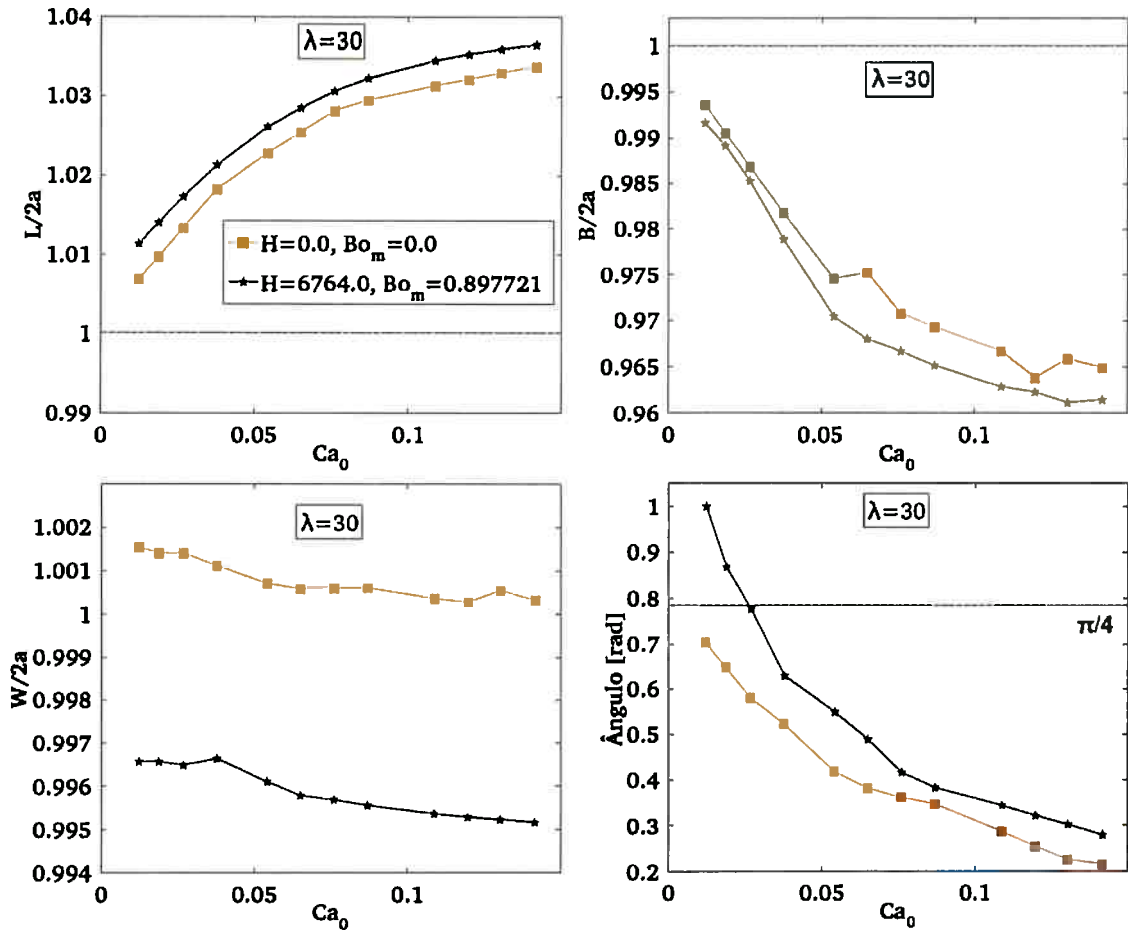


Figura 6.3: Comparação entre os parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores:  $Bo_m = 0.0, 0.8977$ ;  $\lambda = 30$  e  $\chi = 0.8903$ .

Caso	NCE	NPEE	TPPI [s]
C2.5a	275824	10800	$3.6745 \times 10^{-1}$
C05a	269920	11900	$4.6232 \times 10^{-1}$
C10a	292816	11500	$4.5756 \times 10^{-1}$
C20a	317640	11500	$3.9457 \times 10^{-1}$
C40a	319072	12400	$3.9976 \times 10^{-1}$

Tabela 6.4: Alguns resultados das simulações da avaliação de influência do tamanho do domínio, entre eles o NCE: número de células eulerianas, NPEE: número de passos para o estado estacionário e TPPI: média do tempo em segundos dos 1000 primeiros passos de integração.

e um crescimento da deformação com o aumento do domínio variando de 59.63% no caso C2.5a até 63.31% em C20a, nos casos C05a e C10a a deformação difere do valor de referência em 1.1% e 0.22% respectivamente; a deformação do menor eixo no plano  $xy$ ,  $B$ , apresentando uma deformação média de referência para o estado estacionário de 23.08% e uma redução gradual da diferença da deformação com o valor de referência com o aumento do domínio variando de 1.079% no caso C2.5a até 0.001% em C20a, nos casos C05a e C10a a diferença foi de 0.393% e 0.060% respectivamente; a deformação da dimensão da gotícula na direção  $z$ ,  $W$ , apresentando uma deformação média de

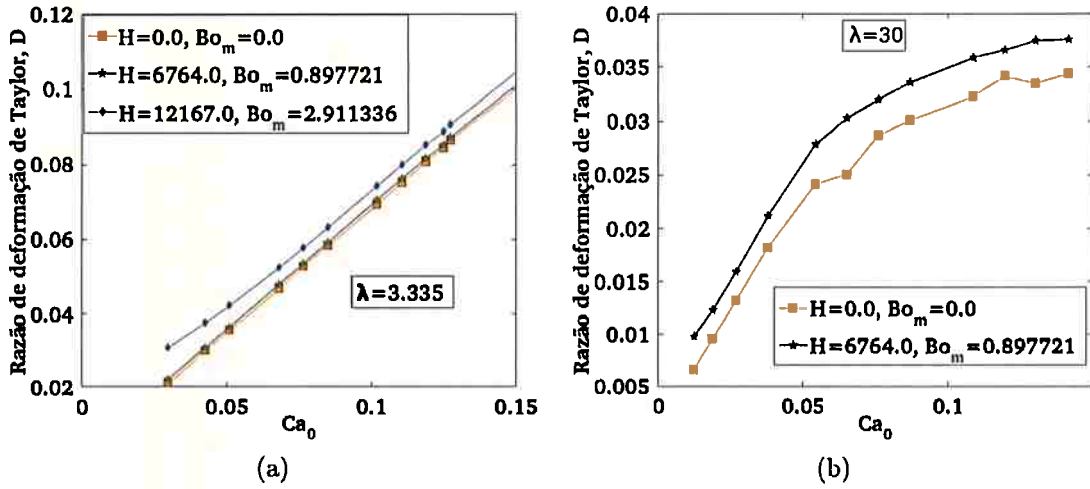


Figura 6.4: Comparação entre razões de deformação de Taylor,  $D = (L - B)/(L + B)$ , das gotículas no estado de equilíbrio resultantes de simulações de um escoamento cisalhante simples para os valores: (a)  $\lambda = 0.335$ ,  $\chi = 0.8903$ ,  $Bo_m = 0.0, 0.8977, 2.9113$  e (b)  $\lambda = 30$ ,  $\chi = 0.8903$ ,  $Bo_m = 0.0, 0.8977$ .

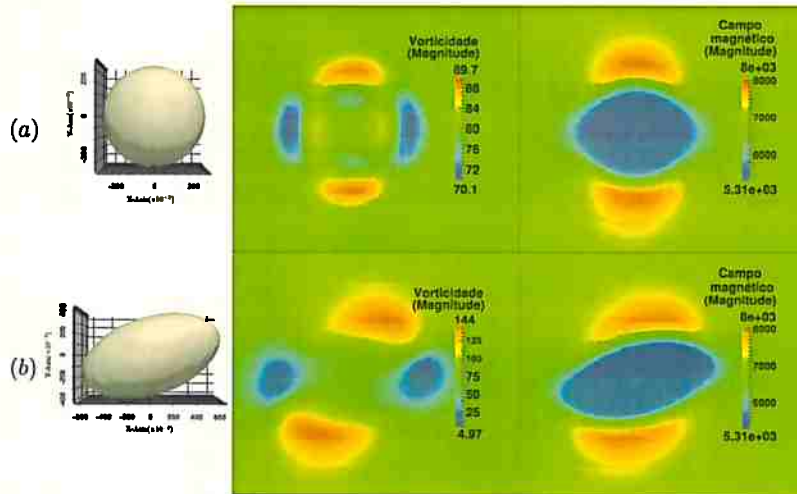


Figura 6.5: Formato da gotícula (na esquerda), magnitude de vorticidade (no centro) e magnitude do campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes de uma simulação com  $Bo_m = 0.897721$ , razão de viscosidade  $\lambda = 3.335$ , número de capilaridade  $Ca_0 = 0.5$  e  $\chi = 0.8903$ : (a) do primeiro passo de integração e (b) do estado estacionário.

referência para o estado estacionário de 22.26% com o caso  $C2.5a$  apresentando um comportamento diferenciado dos demais alongando  $W$  em 16.49% enquanto nos outros casos ocorre um estreitamento gradual da gotícula em  $W$  com o aumento do domínio cuja deformação varia de 22.06% em  $C05a$  até 22.138% em  $C20a$  e no caso  $C10a$  a deformação difere do valor de referência em 0.127%; a orientação da gotícula no escoamento, mensurada pelo ângulo  $\theta$  (Figura 5.1), apresentou inclinação média de referência igual a  $1.0322 \pm 3.4167 \times 10^{-2}$  radianos e pelos casos estudados não foi possível inferir uma relação do tamanho do domínio com a orientação da gotícula (para maiores detalhes sobre a orientação em cada caso veja a Tabela 6.3); a quantidade de células eulerianas utilizadas pelos casos  $C2.5a$ ,  $C05a$ ,  $C10a$ ,  $C20a$  e  $C40a$  no instante inicial são 204928, 218752, 226752, 230848 e 269504 e no instante considerado para o estado estacionário (veja Tabela 6.3) são 275824, 269920, 292816, 317640 e 319072 respectivamente, o caso  $C2.5a$  apesar de utilizar o menor domínio no presente



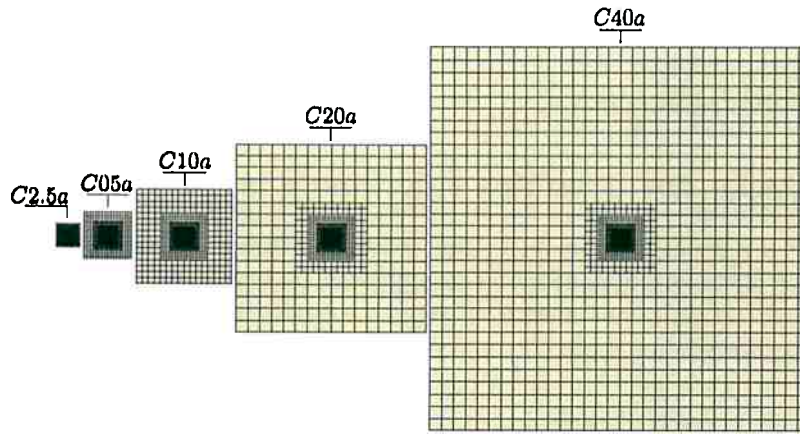


Figura 6.6: Seção transversal paralela ao plano  $xy$  dos domínios utilizados na avaliação de influência do tamanho do domínio.

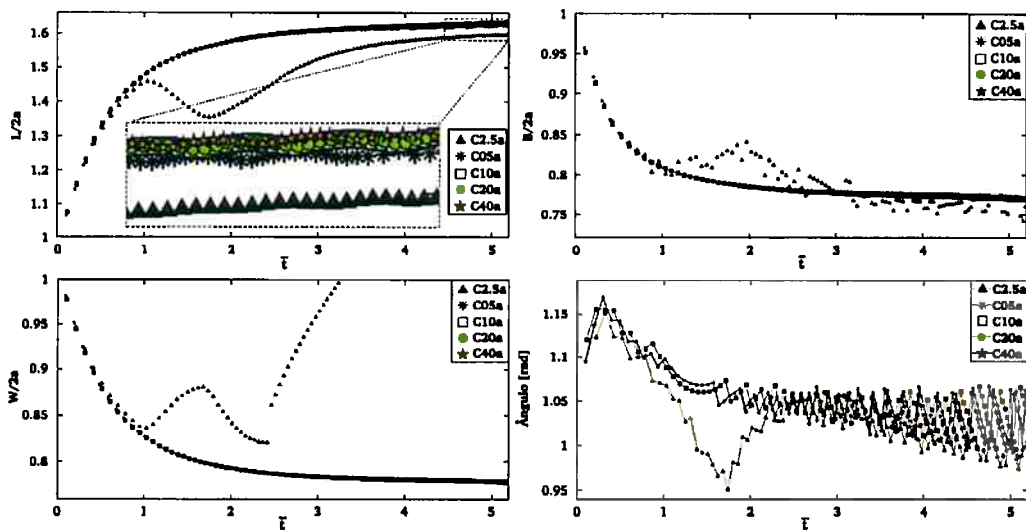


Figura 6.7: Deformação dos parâmetros geométricos e orientação de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante submetidas a um campo magnético externo.

estudo usa mais células eulerianas no estado estacionário que o caso  $C05a$  devido a maneira que a gotícula evolui nesse caso em específico, uma consideração importante quanto ao número de célula é que apesar da razão dos volumes dos domínios de dois casos consecutivos ser igual a 8 e que a razão do maior para o menor volume ser de 4096 a diferença percentual do número de células eulerianas utilizadas para esses casos não ultrapassa 16%; não foi possível inferir uma relação entre o número de passos necessários para atingir o estado estacionário (NPEE), a média do tempo em segundos dos 1000 primeiros passos de integração (TPPI) e o tamanho do domínio utilizado.

O domínio do caso  $C20a$  foi o escolhido para a aplicação a seguir por apresentar dimensões mínimas requeridas para uma futura simulação de entrega de fármacos no olho humano (Mefford *et al.*, 2007) e por usar menos memória que o domínio do caso  $C40a$  mas apresentando ainda bons resultados.

### 6.3 Resolução dos domínios euleriano e lagrangiano

Nesta seção a influência da resolução dos domínios euleriano e lagrangiano na deformação e determinação de algumas propriedades de uma gotícula de ferrofluido num escoamento cisalhante simples sob a ação de um campo magnético externo é estudada.

O caso  $C20a$  descrito na Seção 6.2, cujo domínio foi selecionado para a aplicação, é estudado aqui com três diferentes resoluções para as malhas eulerianas e lagrangiana, identificadas pelos casos  $C20a5120$ ,  $C20a20480$  e  $C20a81920$ . O ponto de partida na seleção da resolução é a discretização da gotícula inicialmente no formato esférico por uma malha triangular conhecida na literatura por “domo geodésico” (Sahr *et al.*, 2003) construída a partir de um icosaedro regular inscrito numa esfera que por subdivisão recursiva das arestas em seu ponto médio aumenta o número de triângulos por um fator 4 e os novos vértices são projetados na esfera como ilustrado na Figura 4.2, três diferentes triangularizações são adotadas para a gotícula contendo 5120, 20480 e 81920 triângulos respectivamente descritas com maiores detalhes na Tabela 6.5. A seguir a resolução do domínio

Caso	Vértices	Triângulos	Arestas	$h_{l_{max}}$	$h_{l_{min}}$	$h_{l_{med}}$
$C20a5120$	2562	5120	7680	$1.0664 \times 10^{-4}$	$8.9315 \times 10^{-5}$	$9.7469 \times 10^{-5} \pm 6.3357 \times 10^{-6}$
$C20a20480$	10242	20480	30720	$5.3366 \times 10^{-5}$	$4.4664 \times 10^{-5}$	$4.8756 \times 10^{-5} \pm 3.1702 \times 10^{-6}$
$C20a81920$	40962	81920	122880	$2.6689 \times 10^{-5}$	$2.2333 \times 10^{-5}$	$2.4381 \times 10^{-5} \pm 1.5854 \times 10^{-6}$

**Tabela 6.5:** Caso considerado, número de vértices, triângulos e arestas. Nas colunas seguintes o comprimento de aresta máximo, mínimo e médio para cada malha.

euleriano é determinada considerando-se uma razão entre as malhas euleriana e lagrangiana maior ou igual a 2 como em Lai *et al.* (2008) e Pivello *et al.* (2014). A tabela 6.6 apresenta a razão e a resolução do nível mais fino  $h = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$  para cada um dos casos.

Caso	$h/h_{l_{med}}$	$h$	NCEIG	$a/h$
$C20a5120$	2.0519	$2.0 \times 10^{-4}$	$1.1270 \times 10^3$	6.46
$C20a20480$	2.0510	$1.0 \times 10^{-4}$	$9.0130 \times 10^3$	12.91
$C20a81920$	2.0508	$5.0 \times 10^{-5}$	$7.2103 \times 10^4$	25.82

**Tabela 6.6:** Caso considerado, razão da resolução das malhas euleriana e lagrangiana ( $h/h_{l_{med}}$ ), resolução do nível mais fino do domínio euleriano ( $h$ ), o NCEIG: número de células eulerianas do interior da gotícula e a razão do raio inicial da gotícula pela resolução do nível mais fino euleriano ( $a/h$ ).

A Figura 6.8 mostra a deformação dos parâmetros geométricos da gotícula ( $L$ ,  $B$ ,  $W$  e  $D$ ) para os casos  $C20a5120$ ,  $C20a20480$  e  $C20a81920$ . Dado que um dos objetivos desse estudo é avaliar a influência da resolução do domínio na deformação considera-se que o domínio com a menor resolução  $C20a81920$  (mais refinado) fornece a melhor aproximação. A diferença relativa máxima de deformação entre esses casos não ultrapassa 2.6% evidenciando que as três resoluções de malha são adequadas para o estudo da deformação de uma gotícula nessa simulação. Esse resultado era esperado dado que a resolução de malha do caso  $C20a5120$  (menor resolução) foi utilizada na validação do modelo no Capítulo 5 e apresentou ótimos resultados quando comparados à experimentos de laboratório, resultados numéricos e teóricos presentes na literatura. Além da deformação da gotícula outras informações de propriedades estimadas no interior da gotícula simulada tais como o campo magnético e a vorticidade são importantes na aplicação prevista. A Figura 6.9 ilustra o efeito da resolução de malha no campo magnético estimado para o primeiro passo de integração nas três resoluções estudadas, note que o campo é subestimado no caso  $C20a5120$  (Figura 6.9 (c)). A qualidade dessas aproximações está diretamente ligada ao número de células eulerianas representando essas quantidades no interior dessa gotícula. A Tabela 6.6 apresenta o número estimado de células eulerianas no interior da gotícula para cada uma das resoluções (na quarta coluna) e a razão do raio inicial da gotícula e do espaçamento euleriano  $a/h$  (na quinta coluna). Trabalhos recentes relatam que um valor adequado para  $a/h$  está entre 12 e 20 (Afkhani *et al.*, 2008, 2010; Shi *et al.*, 2014),

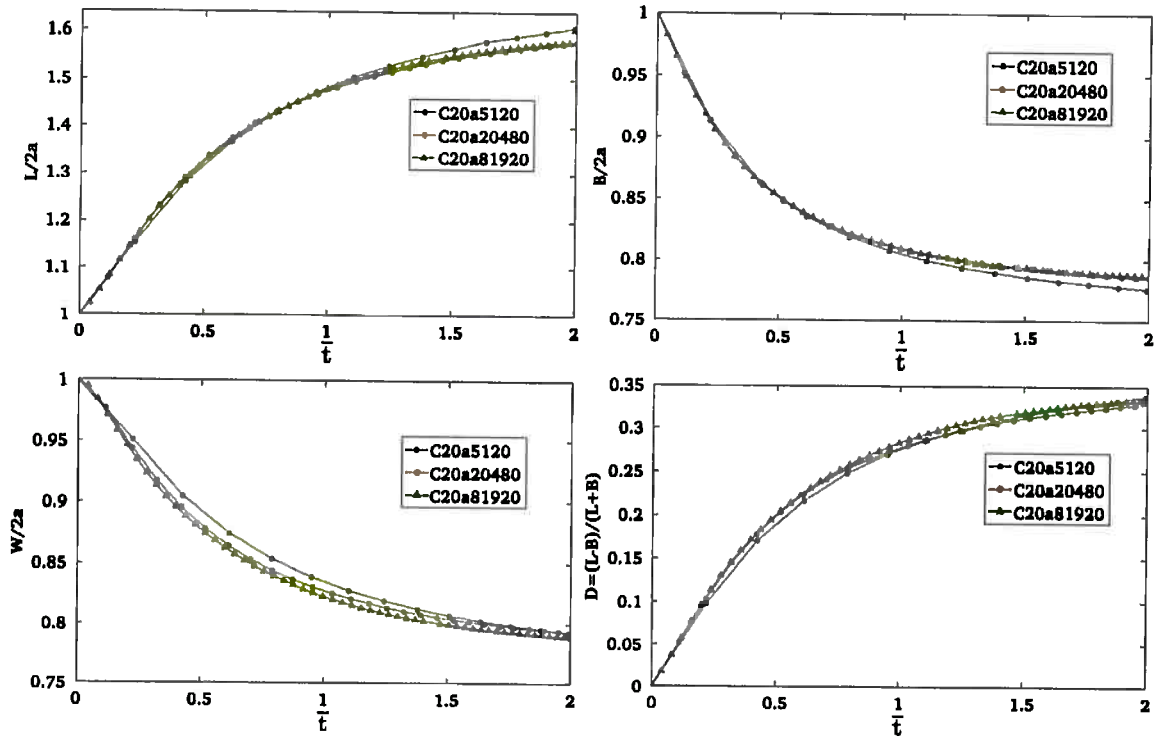


Figura 6.8: Deformação dos parâmetros geométricos de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante submetidas a um campo magnético externo para três resoluções de domínios euleriano e lagrangiano em função do tempo adimensional  $\tilde{t}$  (dado pelo tempo atual multiplicado pela razão de cisalhamento  $\dot{\gamma}$ ).

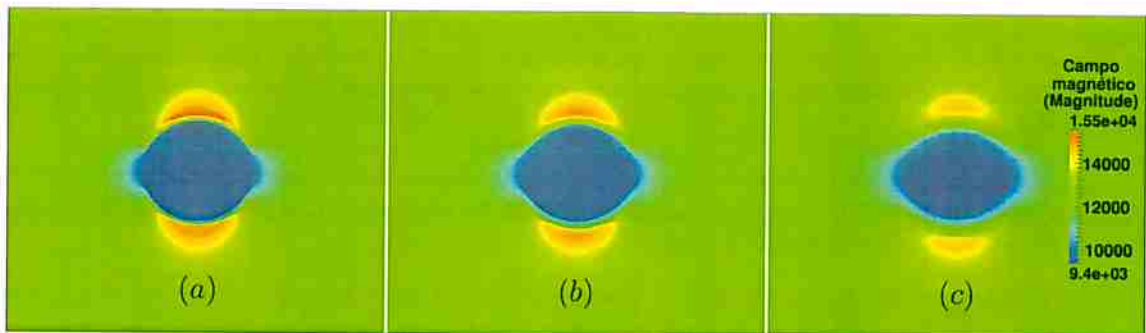


Figura 6.9: Campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  no primeiro passo de integração para o caso: (a) C20a81920, (b) C20a20480 e (c) C20a5120.

entretanto é importante citar que esses trabalhos (assim como todos os encontrados na literatura do assunto) são bidimensionais ou axissimétricos podendo assim oferecer grandes valores para  $a/h$  com custos computacionais moderados. Um fato importante sobre a presente metodologia é que o custo computacional cresce em torno de 25% a 33% para um refinamento de malha euleriano (veja Seção 4.6) e em 300% nas operações no qual o número de triângulos está envolvido num refinamento lagrangiano (o número de triângulos aumenta por um fator 4 veja a Figura 4.2). Nesse estudo da influência da resolução dos domínios euleriano e lagrangiano os resultados indicam que a opção mais adequada para a aplicação a seguir é a resolução do caso C20a20480, dado que comparado-se com o caso C20a81920 apresenta uma diferença máxima de deformação nos parâmetros geométricos da gotícula menor que 0.3% e tem um custo computacional muito menor, além disso utiliza uma razão de  $a/h = 12.91$  adequada segundo a literatura, essa razão equivale a um número de  $9.0130 \times 10^3$  células eulerianas (ou o volume correspondente que elas ocupam) no interior de uma

gotícula tridimensional.

## 6.4 Gotícula de ferrofluido na presença de um surfactante insolúvel

Nesta seção os efeitos dos tipos de fases, da presença de surfactante e da influência de um campo magnético uniforme externo (quando uma das fases é um ferrofluido) sobre a deformação, orientação e vorticidade são estudados num escoamento cisalhante simples dado por

$$\mathbf{u} = (\dot{\gamma}y, 0, 0), \quad -1.1520 \times 10^{-2} \text{ m} \leq y \leq 1.1520 \times 10^{-2} \text{ m},$$

em seis situações de escoamento bifásico composto por:

- *A1, B1, C1*: fases newtonianas com a interface limpa (sem surfactante);
- *A2, B2, C2*: fases newtonianas com a interface revestida de surfactante;
- *A3, B3, C3*: uma das fases sendo um ferrofluido imerso num fluido não magnetizável com a interface limpa (sem surfactante) na presença de um campo magnético uniforme externo  $H_0 = 0$ ;
- *A4, B4, C4*: uma das fases sendo um ferrofluido imerso num fluido não magnetizável com a interface limpa (sem surfactante) na presença de um campo magnético uniforme externo  $H_0 = 6032 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  (*A4, B4*) ou  $H_0 = 12167 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  (*C4*);
- *A5, B5, C5*: uma das fases sendo um ferrofluido imerso num fluido não magnetizável com a interface revestida de surfactante na presença de um campo magnético uniforme externo  $H_0 = 0$ ;
- *A6, B6, C6*: uma das fases sendo um ferrofluido imerso num fluido não magnetizável com a interface revestida de surfactante na presença de um campo magnético uniforme externo  $H_0 = 6032 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  (*A4, B4*) ou  $H_0 = 12167 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$  (*C4*);

Esses escoamentos são discretizados no domínio e na resolução determinados nas Seções 6.2 e 6.3 respectivamente. Os parâmetros de simulação estão listados nas Tabelas 6.7, 6.8 e 6.9 para os casos *A#* e *B#*, e na Tabela 6.10 para os casos *C#*. Os parâmetros físicos de ferrofluido adotados são baseados em dados experimentais de [Afkhami et al. \(2010\)](#) e a concentração de surfactante e outros parâmetros da simulação nos resultados da Seção 5.1. As Figuras 6.10, 6.11 e 6.12 mostram que no

Caso	<i>A1, B1</i>	<i>A2, B2</i>	<i>A3, B3</i>	<i>A4, B4</i>	<i>A5, B5</i>	<i>A6, B6</i>
$H_0 \text{ (A} \cdot \text{m}^{-1}\text{)}$	-	-	0	$6.032 \times 10^3$	0	$6.032 \times 10^3$
$a \text{ (m)}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$
$\sigma_0 \text{ (N} \cdot \text{m}^{-1}\text{)}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$
$B_{\sigma m}$	-	-	0	$4.3725 \times 10^0$	0	$4.3725 \times 10^0$
$\lambda$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$
$\eta_c \text{ (N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}\text{)}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$
$\eta_d \text{ (N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}\text{)}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$
$\mu_0 \text{ (N} \cdot \text{A}^{-2}\text{)}$	-	-	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$
$\rho_0 \text{ (kg} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$
$\beta$	0	$2.5000 \times 10^{-1}$	0	0	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$
$\zeta$	-	$1.0000 \times 10^0$	-	-	$1.0000 \times 10^0$	$1.0000 \times 10^0$
$\chi$	-	-	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$

Tabela 6.7: Parâmetros de simulação utilizados nos casos *A#* e *B#*.

modelo empregado as deformações e orientação de uma gotícula coincidem para os casos *A1* e *A3* (da mesma maneira que para *A2* e *A5*, *B1* e *B3*, *B2* e *B5*), isto é, uma gotícula de ferrofluido na presença de um campo magnético externo  $H_0 = 0$  (*A3*, *A5*, *B3* e *B5*) e uma gotícula de um fluido newtoniano (*A1*, *A2*, *B1* e *B2*) com as mesmas propriedades físicas (com exceção da permeabilidade magnética

Caso	A1	A2	A3	A4	A5	A6
$M_n$	-	-	-	$5.7176 \times 10^{-2}$	-	$5.7176 \times 10^{-2}$
$Re$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$
$\dot{\gamma}$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$
$Ca$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$

Tabela 6.8: Alguns adimensionais utilizados nos casos A#.

Caso	B1	B2	B3	B4	B5	B6
$M_n$	-	-	-	$2.8589 \times 10^{-2}$	-	$2.8589 \times 10^{-2}$
$Re$	$2.7450 \times 10^{-1}$	$2.7450 \times 10^{-1}$	$2.7450 \times 10^{-1}$	$2.7450 \times 10^{-1}$	$2.7450 \times 10^{-1}$	$2.7450 \times 10^{-1}$
$\dot{\gamma}$	$1.3071 \times 10^1$	$1.3071 \times 10^1$	$1.3071 \times 10^1$	$1.3071 \times 10^1$	$1.3071 \times 10^1$	$1.3071 \times 10^1$
$Ca$	$1.2500 \times 10^{-1}$	$1.2500 \times 10^{-1}$	$1.2500 \times 10^{-1}$	$1.2500 \times 10^{-1}$	$1.2500 \times 10^{-1}$	$1.2500 \times 10^{-1}$

Tabela 6.9: Alguns adimensionais utilizados nos casos B#.

$\mu$ ) apresentam mesmas deformações e orientação, portanto apenas os resultados com gotículas de ferrofluido serão reportados a seguir. As gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético externo  $H_0 = 0$  revestidas com surfactante (casos A5 e B5) tornam-se mais alongadas na direção de seus eixos maiores (L), consideravelmente mais estreitas ao longo de seus eixos menores (B) e (W) (Figura 5.1). O mesmo comportamento é observado em gotículas de ferrofluido limpas na presença de um campo magnético externo não nulo (casos A4 e B4) quando comparadas com gotículas de ferrofluido limpas na presença de um campo magnético nulo (A3 e B3). Entretanto as gotículas quando revestidas por surfactante tornam-se mais orientadas e na presença de um campo magnético não nulo tornam-se menos orientadas com a direção do escoamento. Resultados similares sobre a influência de um surfactante (em gotículas newtonianas na Seção 5.1) e do efeito de um campo magnético externo em gotas de ferrofluido (Seção 6.1) foram encontrados no presente trabalho para diferentes números de razão de viscosidades  $\lambda$  e números de capilaridade. O estudo de gotículas revestidas de surfactante na presença de um campo magnético externo não nulo num escoamento cisalhante é inédito. As gotículas de ferrofluido revestidas de surfactante e na presença de um campo magnético não nulo (A6 e B6) apresentam as maiores deformações e não mostram uma tendência de orientação quando comparadas com gotículas de ferrofluido limpas na presença de um campo magnético nulo (A3 e B3). As maiores deformações e a falta de tendência de orientação nesses casos são resultantes da composição dos efeitos causados pelo surfactante (aumenta a deformação e a orientação no escoamento estudado) e pela presença de um campo magnético externo não nulo (aumenta a deformação e reduz a orientação no escoamento estudado), tais efeitos colaboram para a deformação e competem na orientação da gotícula. No presente estudo as gotículas mais deformadas tem número de capilaridade  $Ca = 0.25$  (casos A#), enquanto as gotículas com  $Ca = 0.125$  (casos B#) são as menos orientadas na direção do escoamento.

As Figuras 6.13 a 6.24 mostram para os casos A3 a A6 e B3 a B6 o formato da gotícula, a distribuição de surfactante, a magnitude de vorticidade e o campo magnético de acordo com a disponibilidade dessas propriedades para cada caso. O formato da gotícula e as propriedades citadas são mostrados para diferentes momentos da simulação (para o primeiro passo de integração e para o estado estacionário na maior parte das figuras) para duas seções transversais aos planos  $xy$  e  $yz$ , entretanto um número não limitado de seções transversais podem ser fornecidas pelo modelo, dado que os resultados são tridimensionais e não dependem de simetria. Essas figuras ilustram o potencial do modelo como ferramenta de estudo de escoamentos de gotículas de ferrofluido que não apresentam simetria radial e evidenciam a contribuição do modelo para a área de estudo, dado que na literatura estudada os modelos numéricos encontrados são abordagens bidimensionais ou dependentes da simetria do problema (axissimétricos por exemplo). As gotículas no estado estacionário apresentam um formato aproximadamente elipsoidal e não apresentam simetria radial como mostrado nas Figuras 6.10, 6.11 e 6.12. Quando estão na presença de um campo magnético uniforme



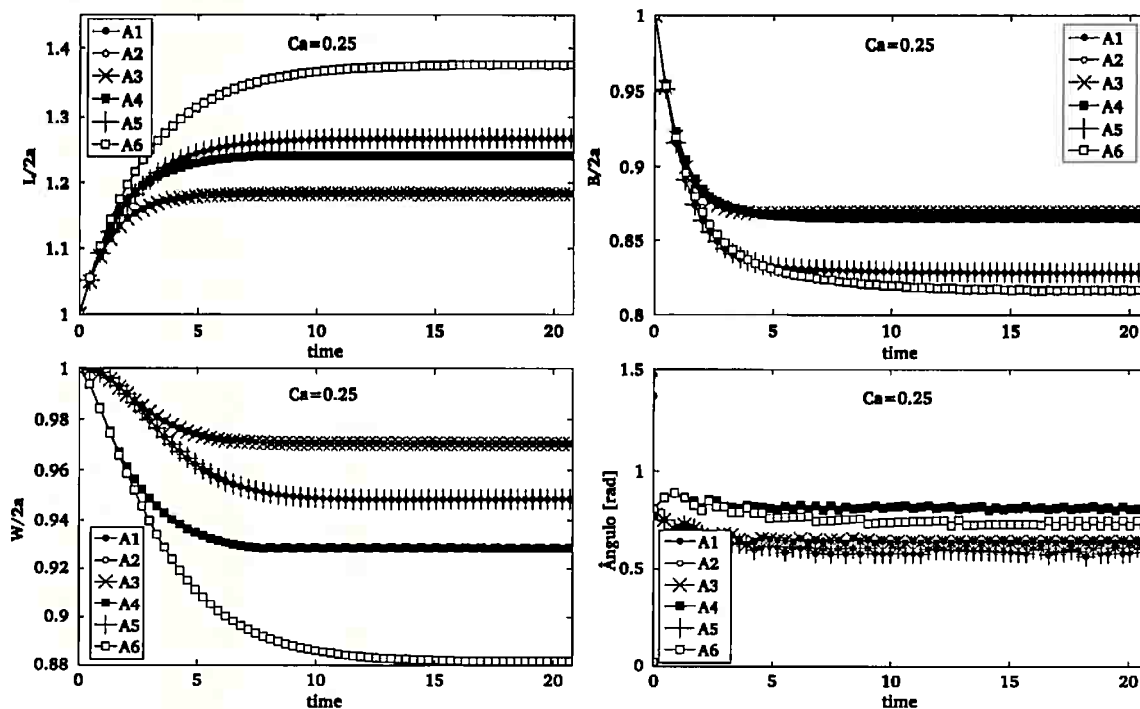


Figura 6.10: Comparação entre as deformações dos parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos caos A#.

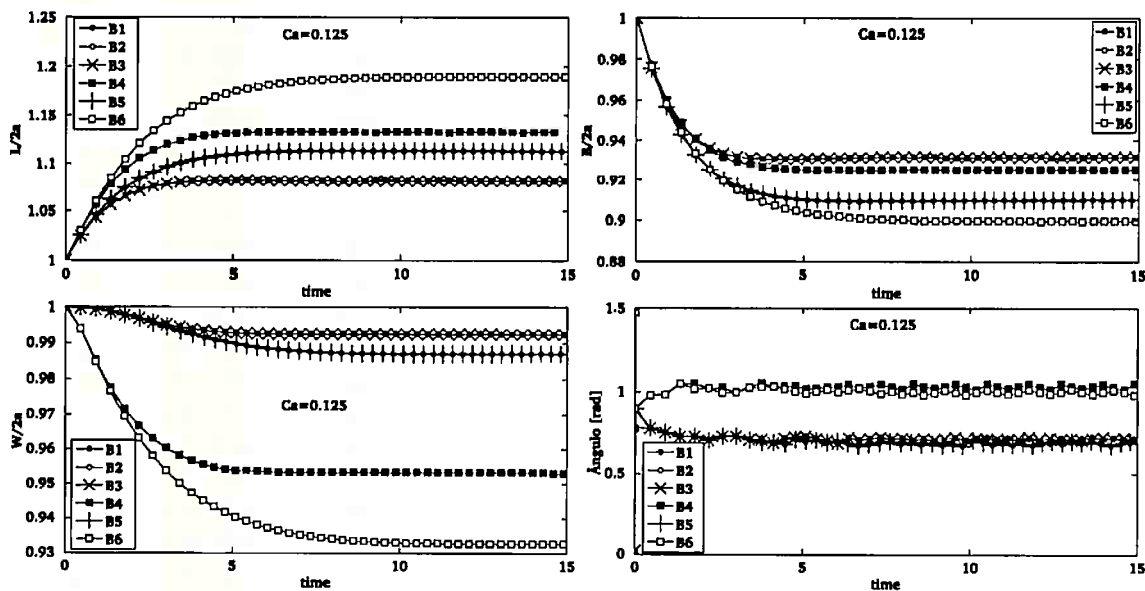


Figura 6.11: Comparação entre as deformações dos parâmetros geométricos e a orientação da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos caos B#.

não nulo apresentam um ângulo de inclinação maior, pois são atraídas e tendem a alinharem-se na direção do campo (direção  $y$ ) (Figuras 6.14, 6.18 e 6.20). Se a gotícula é revestida com surfactante a distribuição é mostrada sobre a representação da interface da gotícula com máxima concentração de surfactante situada próxima aos extremos do eixo maior e mínima próxima aos extremos do eixo menor das gotículas no estado estacionário. A magnitude de vorticidade é apresentada para a vizinhança da gotícula no domínio euleriano cujos valores mínimo e máximo concentram-se nessa



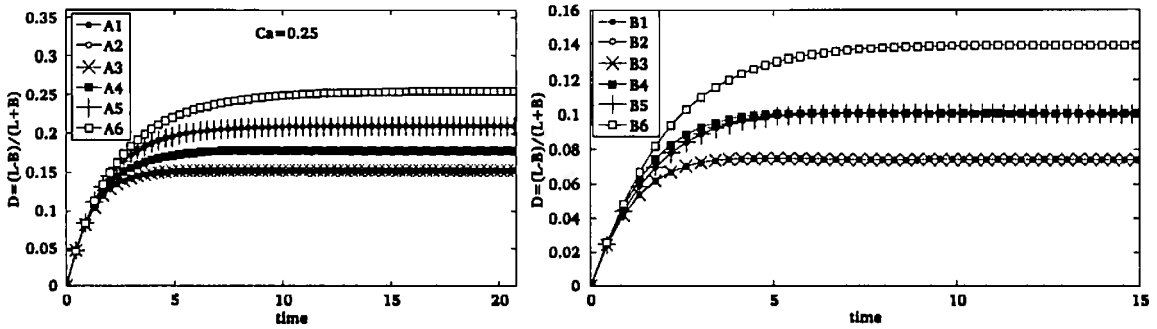


Figura 6.12: Comparação entre as deformações da gotícula no estado de equilíbrio resultantes das simulação dos casos A# e B#.

região, com valores máximos situados próximo aos extremos do eixo maior  $L$  e valores mínimos situados próximo aos extremos do eixo  $B$ . As Figuras 6.14(b), 6.20(c) e 6.21(c) dentre outras mostram que o aumento da deformação e a da inclinação da gotícula podem aumentar consideravelmente a magnitude de vorticidade no escoamento na vizinhança da gotícula. O campo magnético nos escoamentos com uma gotícula de ferrofluido na presença de um campo magnético externo, uniforme e não nulo, varia apenas na vizinhança e no interior dessa gotícula, apresentando maiores intensidades nos extremos dessa gotícula na direção  $y$  (direção do campo magnético externo) e menores intensidades em seu interior. Além da magnitude do campo magnético suas componentes na direção  $x$ ,  $y$  e  $z$  são apresentadas e mostram a distribuição do campo em cada direção.

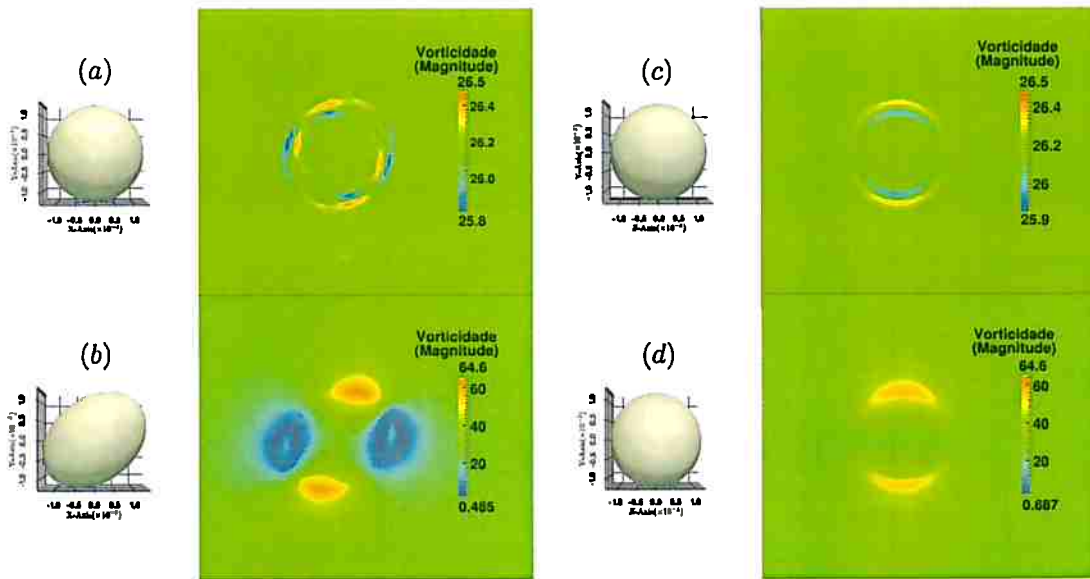
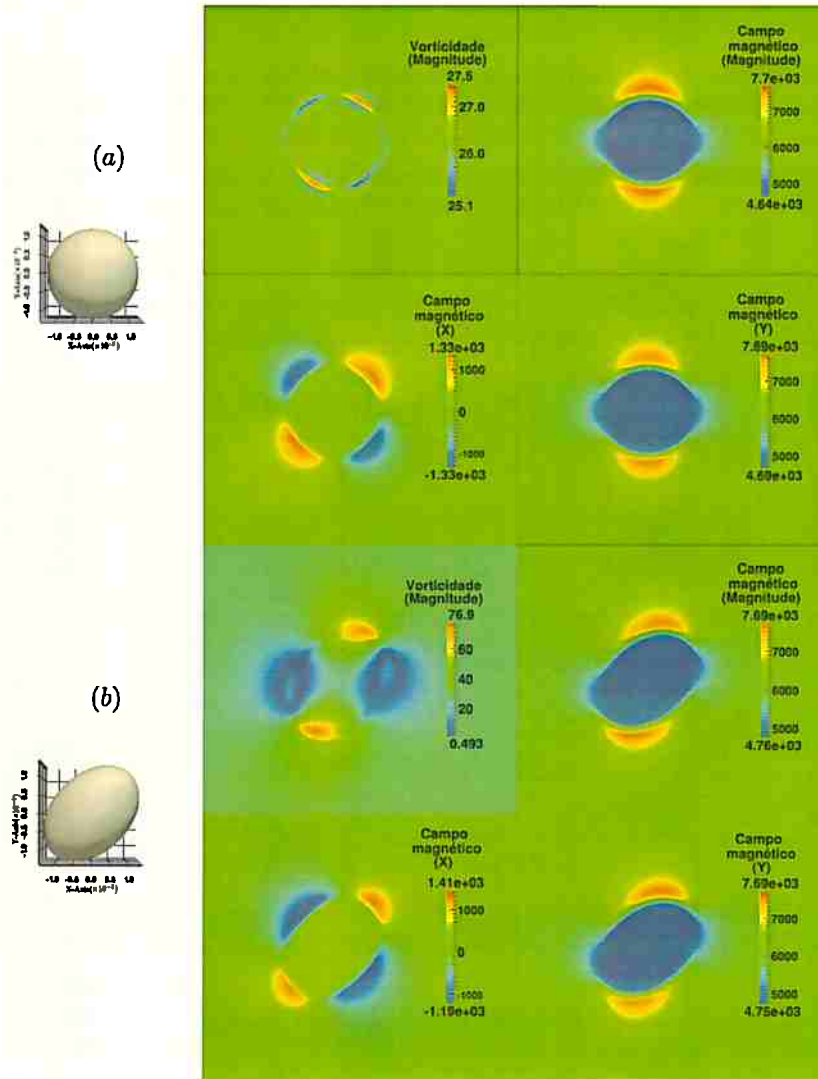
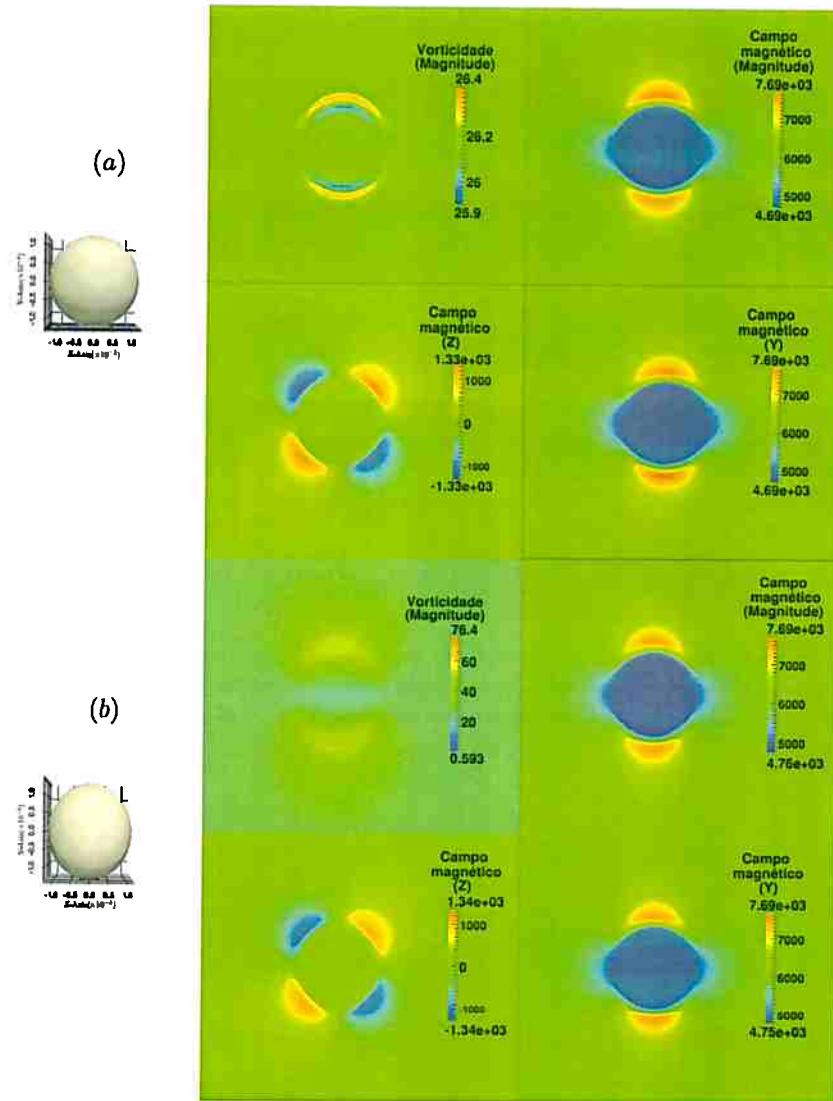


Figura 6.13: Formato da gotícula e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso A3: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração e (d) no estado estacionário.



**Figura 6.14:** Formato da góticula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação do caso A4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no estado estacionário.



**Figura 6.15:** Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso A4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no estado estacionário.

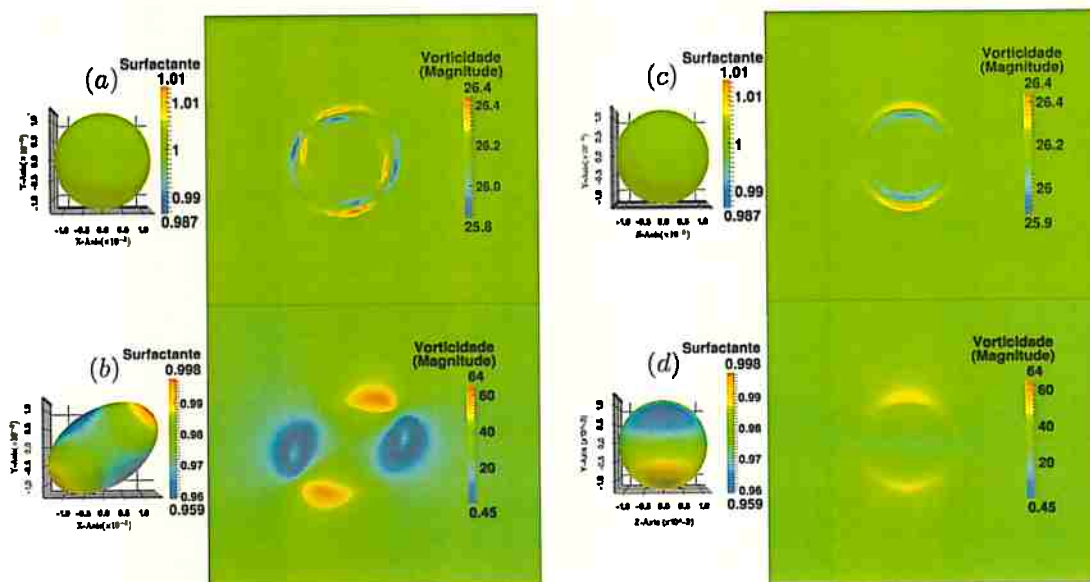


Figura 6.16: Formato da gotícula, distribuição de surfactante e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso A5: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração, e (d) no estado estacionário.

Caso	C1	C2	C3	C4	C5	C6
$H_0 (A \cdot m^{-1})$	-	-	0	$1.2167 \times 10^4$	0	$1.2167 \times 10^4$
$Re$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$	$5.4900 \times 10^{-1}$
$a (m)$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$	$1.2910 \times 10^{-3}$
$M_n$	-	-	-	$1.4053 \times 10^{-2}$	-	$1.4053 \times 10^{-2}$
$\dot{\gamma}$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$	$2.6143 \times 10^1$
$\sigma_0 (N \cdot m^{-1})$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$	$1.3500 \times 10^{-2}$
$Bo_m$	-	-	0	$1.7790 \times 10^1$	0	$1.7790 \times 10^1$
$Ca$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$	$2.5000 \times 10^{-1}$
$\lambda$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$	$1.5000 \times 10^0$
$\eta_c (N \cdot s \cdot m^{-2})$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$	$1.0000 \times 10^{-1}$
$\eta_d (N \cdot s \cdot m^{-2})$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$	$1.5000 \times 10^{-1}$
$\mu_0 (N \cdot A^{-2})$	-	-	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$	$1.2566 \times 10^{-6}$
$\rho_0 (kg \cdot m^{-3})$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$	$1.2600 \times 10^3$
$\beta$	0	$0.5000 \times 10^0$	0	0	$0.5000 \times 10^0$	$0.5000 \times 10^0$
$\zeta$	-	$1.0000 \times 10^0$	-	-	$1.0000 \times 10^0$	$1.0000 \times 10^0$
$\chi$	-	-	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$	$8.9030 \times 10^{-1}$

Tabela 6.10: Parâmetros de simulação utilizados nos casos C#.

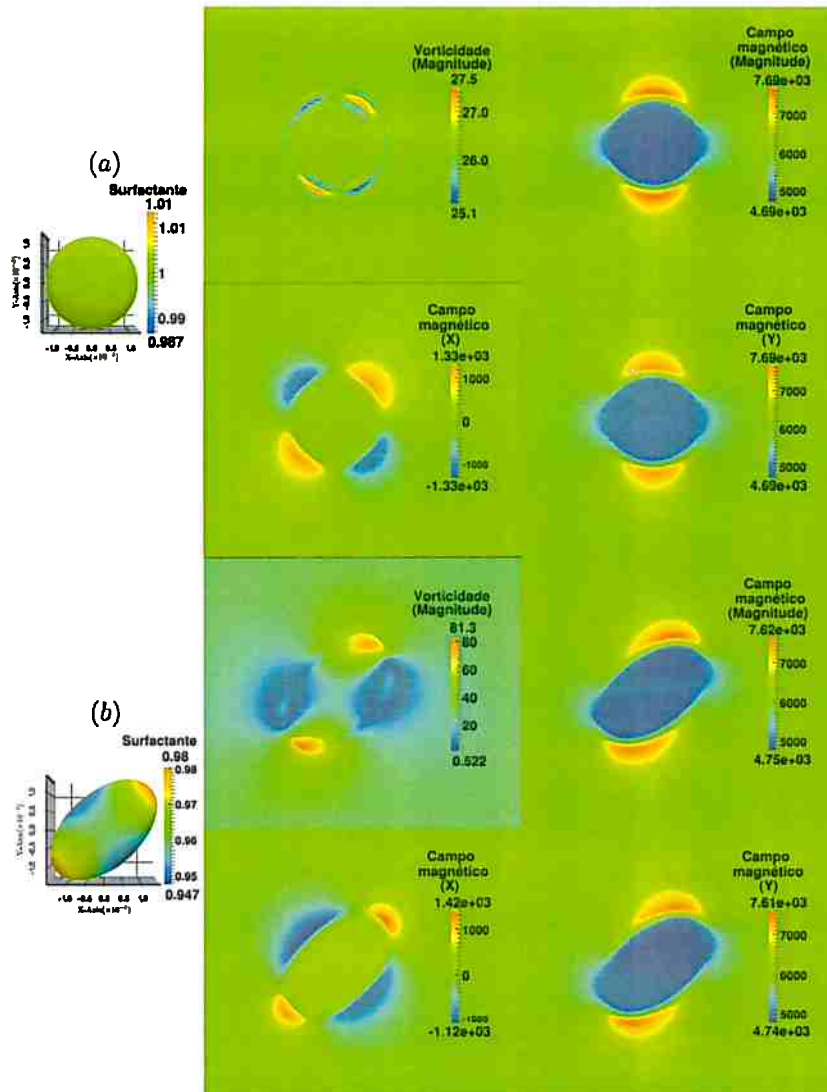


Figura 6.17: Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xz$  resultantes da simulação do caso A6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no estado estacionário.

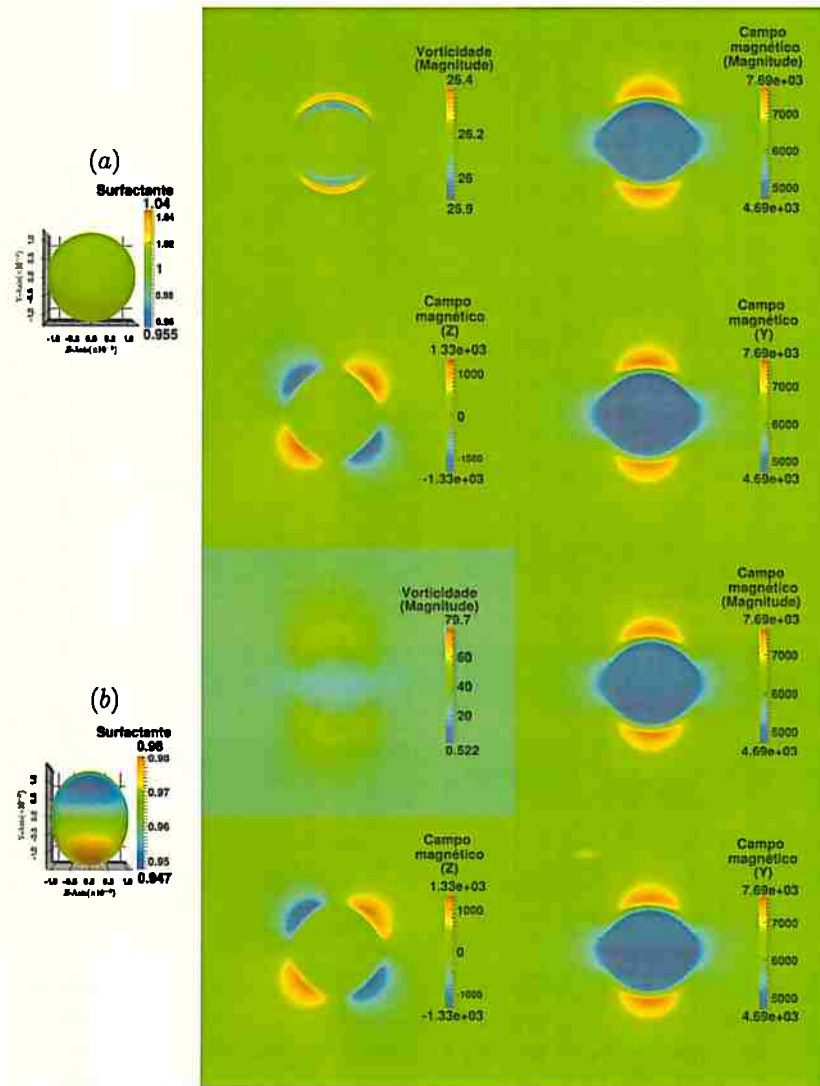
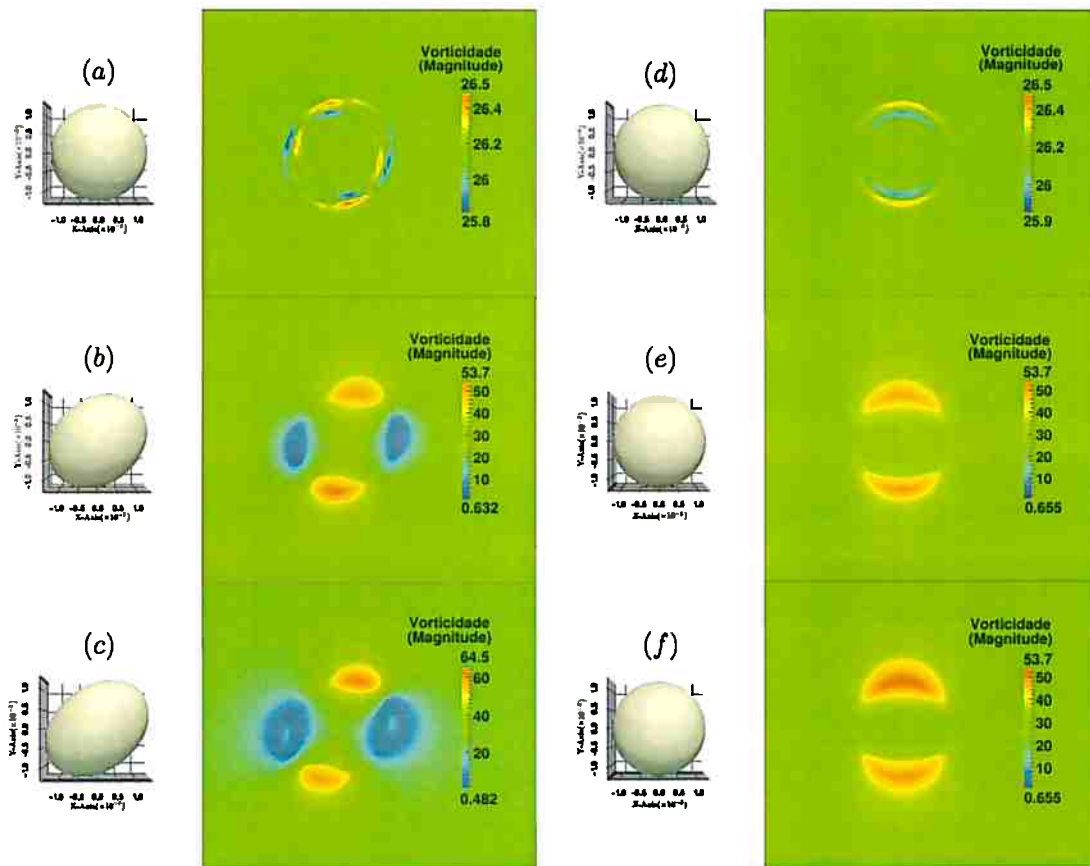
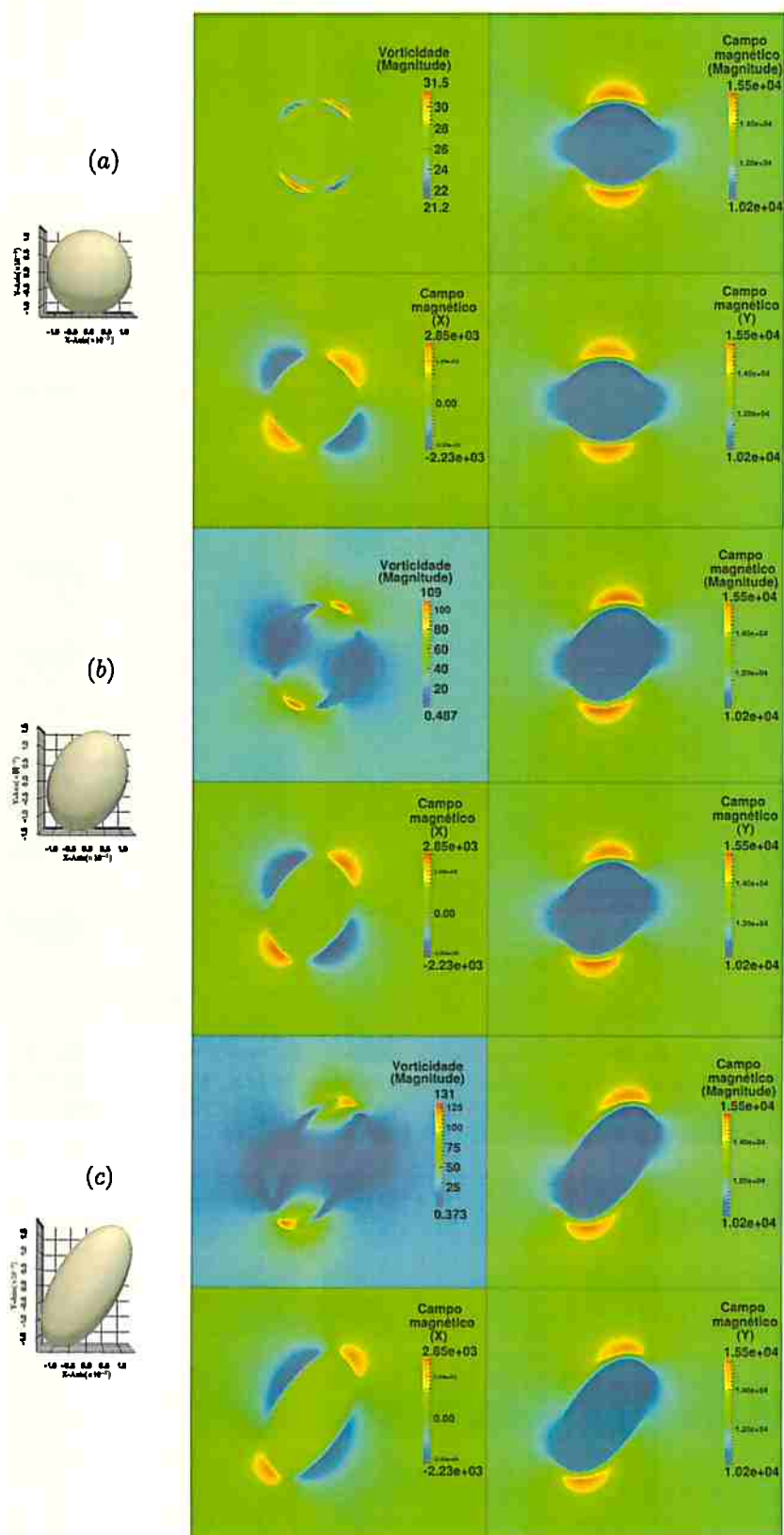


Figura 6.18: Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção z (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção y (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano yz resultantes da simulação do caso A6: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário.

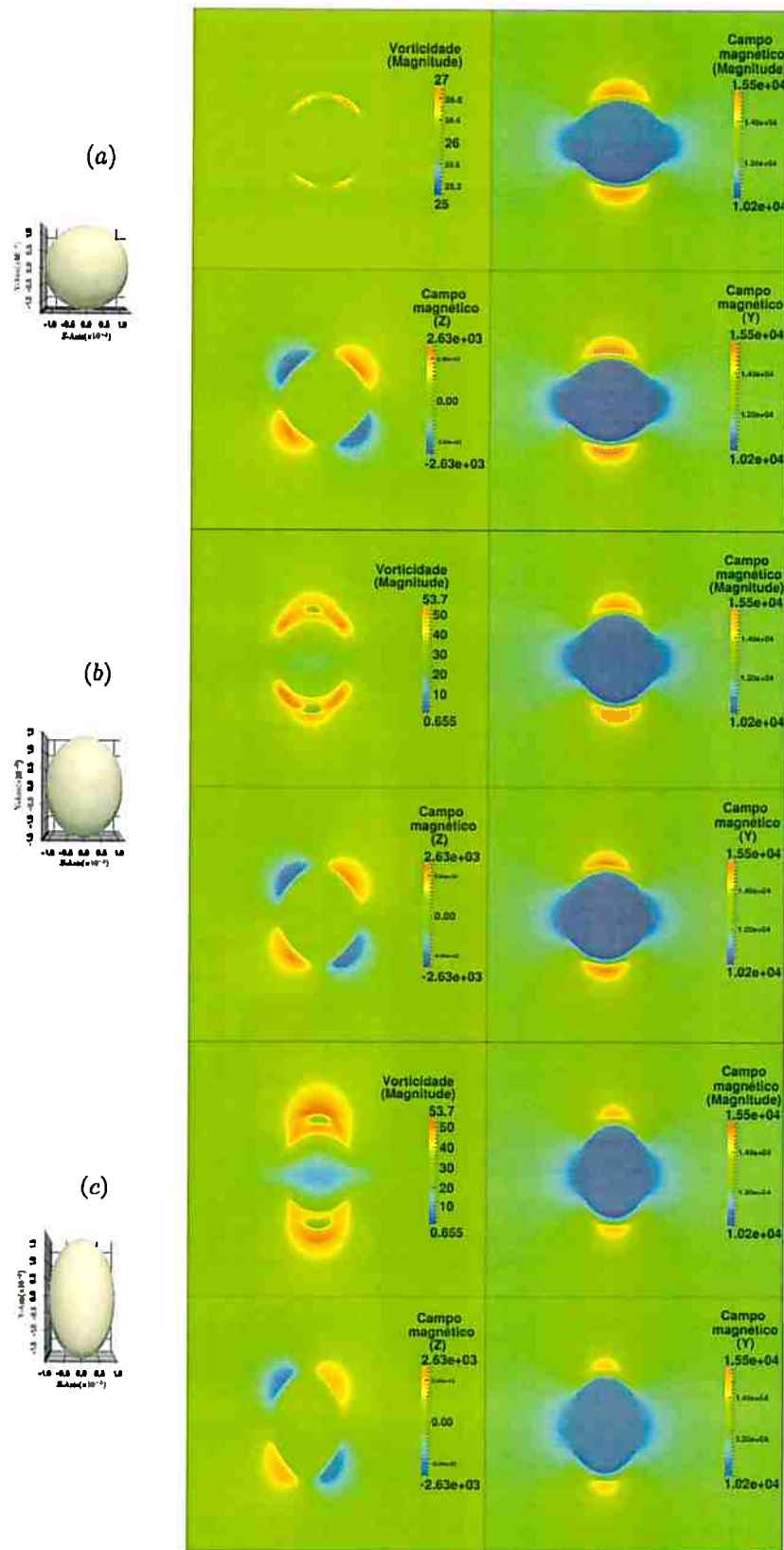




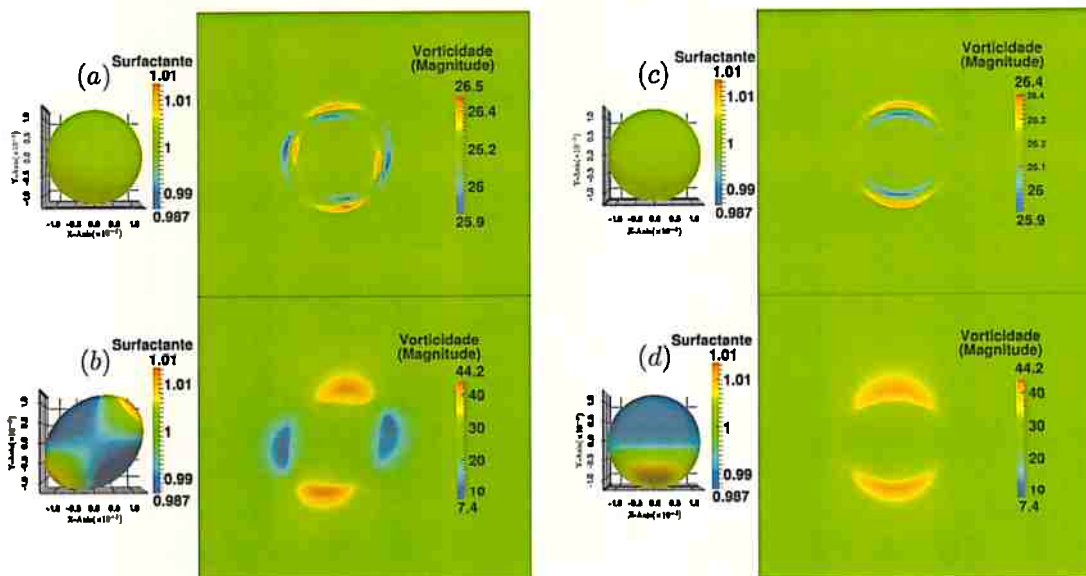
**Figura 6.19:** Formato da gotícula e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso C3: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (d) no primeiro passo de integração, (e) no passo de integração 300 e (f) no estado estacionário.



**Figura 6.20:** Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xy$  resultantes da simulação do caso C4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário.



**Figura 6.21:** Formato da gotícula, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $z$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $yz$  resultantes da simulação do caso C4: (a) no primeiro passo de integração, (b) no passo de integração 300 e (c) no estado estacionário.



**Figura 6.22:** Formato da gotícula, distribuição de surfactante e magnitude de vorticidade resultantes da simulação do caso C5: da seção transversal paralela ao plano  $xy$  (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300; da seção transversal paralela ao plano  $yz$  (c) no primeiro passo de integração e (d) no passo de integração 300.

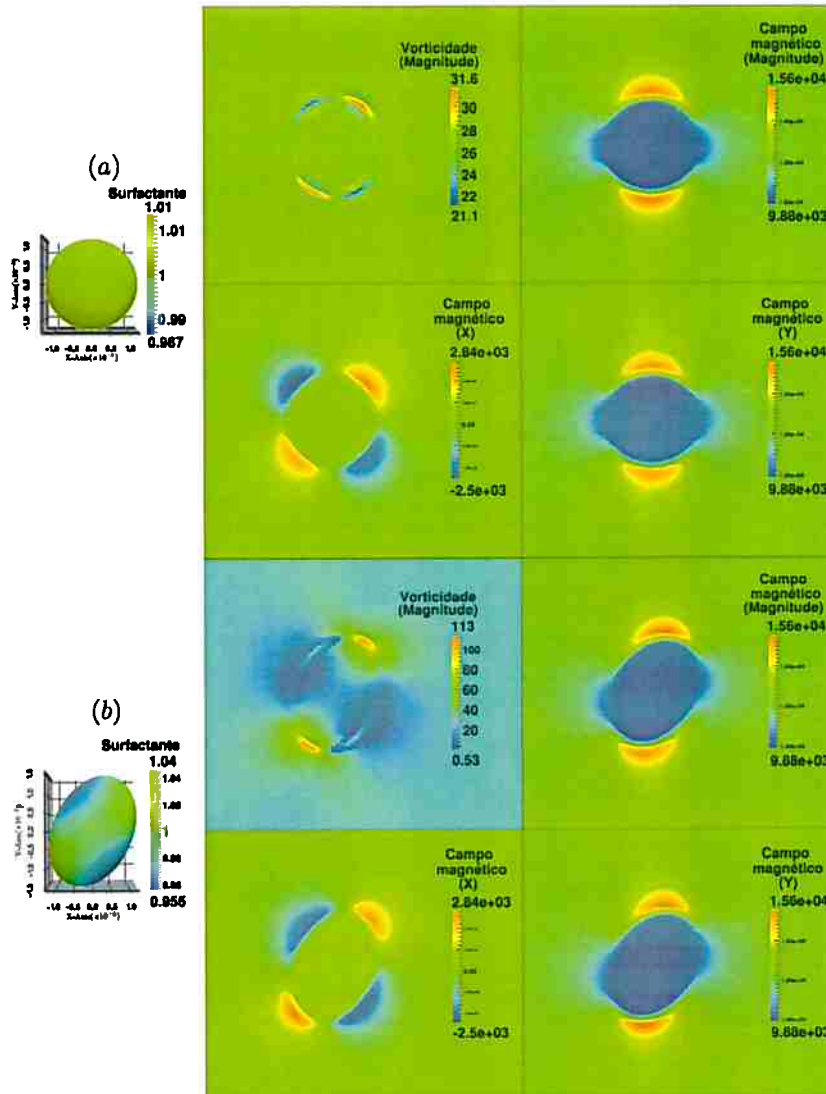
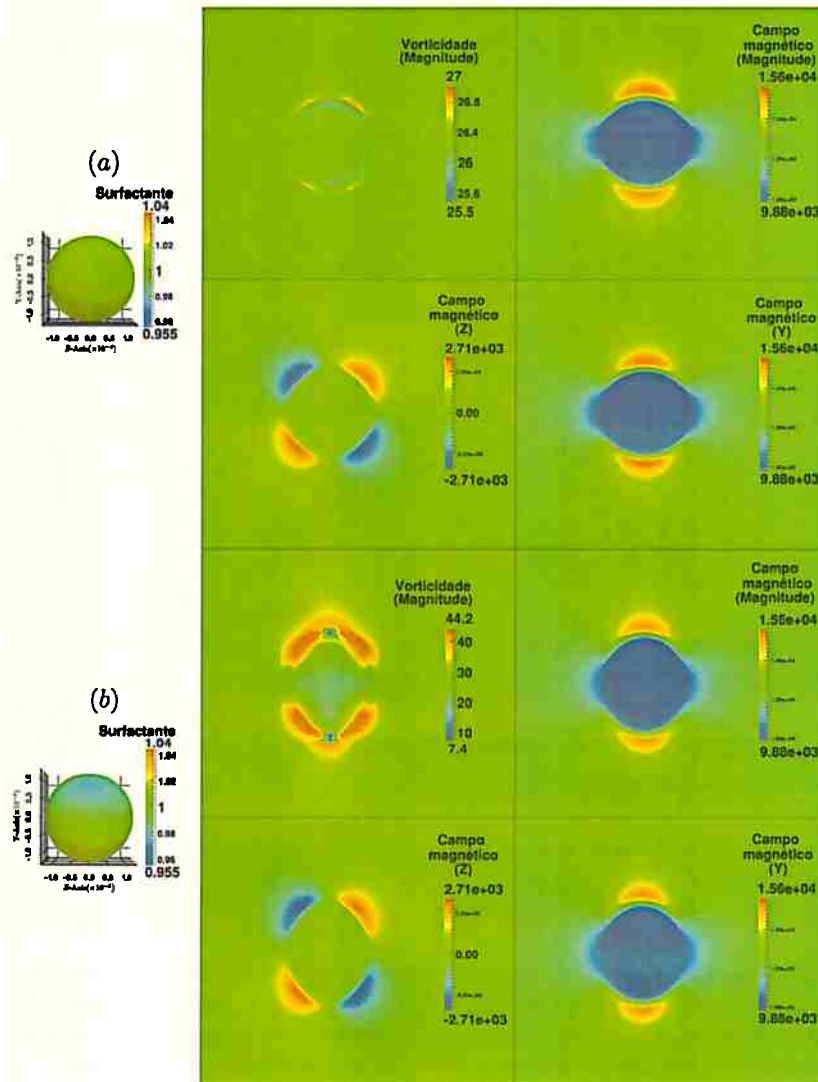


Figura 6.23: Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção  $x$  (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção  $y$  (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano  $xz$  resultantes da simulação do caso C6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300.



**Figura 6.24:** Formato da gotícula, distribuição de surfactante, magnitude de vorticidade (acima na esquerda), campo magnético em  $A \cdot m^{-1}$  (acima na direita), campo magnético na direção z (abaixo na esquerda) e campo magnético na direção y (abaixo na direita) da seção transversal paralela ao plano yz resultantes da simulação do caso C6: (a) no primeiro passo de integração e (b) no passo de integração 300.



## Capítulo 7

# Considerações finais

O presente trabalho estende uma metodologia numérica anterior cujo foco eram os escoamentos incompressíveis bifásicos de fases imiscíveis. A extensão proposta é aplicável à simulação computacional de escoamentos bifásicos na presença de um surfactante e ou de escoamentos com pelo menos uma das fases sendo um ferrofluido sob a ação de um campo magnético externo.

A dinâmica desses escoamentos transientes incompressíveis bifásicos com fases imiscíveis é modelada pelas equações de Navier-Stokes. Nesses escoamentos assume-se a existência de uma interface de separação sujeita a uma força de tensão superficial que sofre influência da concentração de um elemento surfactante insolúvel. Além disso, uma das fases pode ser composta por um componente superparamagnético (um ferrofluido) e a outra fase ser um fluido newtoniano, isotérmico, não magnetizável e não condutor de eletricidade. As principais forças externas atuantes são a de tensão superficial (de contato) e a magnética (de corpo).

O domínio euleriano, um paralelepípedo, é discretizado com uma malha bloco-estruturada composta por refinamentos localizados empregando uma técnica de refinamento adaptativo de malhas (AMR) com operadores diferenciais específicos para essas malhas. O domínio lagrangiano, a interface de separação, é discretizado por uma malha triangular não estruturada onde os operadores “levantamento sobre a interface” responsável por aumentar a precisão da representação da interface, “otimização de malha”, “correção de volume” são aplicados. As fases são determinadas por um função indicadora de fluidos.

A metodologia numérica para a solução do escoamento incompressível bifásico é baseada num método de projeção (Chorin e Marsden, 1992), tal método desacopla a velocidade da pressão. No tempo, as equações são discretizadas por um esquema semi-implícito baseado numa metodologia implícita-explicita (IMEX) (Ascher *et al.*, 1995; Wang e Ruuth, 2008). Os domínios euleriano e lagrangiano são acoplados de maneira discreta, pela definição de uma função distribuição (função Delta de Dirac discreta), que permite a construção dos operadores espalhamento e interpolação discretos intrínsecos do método da fronteira imersa (Peskin, 1977). O movimento da interface de separação entre as fases é realizado por um método de dois estágios com passo variável. Sobre esta interface a equação de advecção-difusão da concentração de surfactante é discretizada por um método de volumes finitos. A força interfacial é aproximada para cada elemento triangular da malha lagrangiana e na presença de uma fase magnética a força magnética é calculada nos elementos de malha euleriana.

A metodologia numérica empregada é verificada numericamente por meio de uma análise de convergência numérica usando a estratégia de “soluções manufaturadas”, avaliada quanto ao custo computacional e validada pela comparação com resultados de experimentos em laboratório e outros resultados teóricos ou numéricos da literatura. A seguir essa metodologia é aplicada ao estudo de gotículas de ferrofluido num escoamento cisalhante na presença de um campo magnético externo. Esse estudo se concentra nos efeitos da magnitude de campo magnético e de surfactante sobre a geometria e orientação da gotícula. Tais estudos são inéditos na literatura e pretendem contribuir para ampliar e desenvolver os estudos de manipulação de gotículas de ferrofluido na presença de um campo magnético externo.

## 7.1 Contribuições

O código base para esse trabalho simulava em três dimensões um escoamento bifásico incompressível com fases newtonianas imiscíveis. O presente trabalho estende a metodologia numérica para tais escoamentos na presença de um surfactante insolúvel e para simular um escoamento bifásico com pelo menos uma das fases sendo um ferrofluido sob a ação de um campo magnético externo. Algumas das contribuições do presente trabalho, inéditas segundo a literatura estudada, são:

- simular a dinâmica de surfactante com conservação local de massa com precisão de máquina sobre certas circunstâncias de qualidade da malha lagrangiana. Tal propriedade é inédita em casos de escoamento totalmente tridimensionais;
- apresentar os primeiros estudos numéricos de um escoamento bifásico transiente com uma gotícula de ferrofluido na presença de um campo magnético externo com uma metodologia totalmente tridimensional e esse mesmo escoamento com gotículas revestidas com surfactante;
- desenvolver uma metodologia de otimização de malha triangular com mapeamento da superfície da interface por aproximação polinomial, priorizando entre outros fatores a forma geométrica da interface, a homogeneidade de áreas dos triângulos e a redução do maior ângulo dos triângulos planos da malha.

## 7.2 Perspectivas para pesquisas futuras

Alguns temas para pesquisas futuras com esse trabalho são:

1. modelar o globo ocular com uma gota de ferrofluido sendo manipulada em seu interior usando o método da fronteira imersa, visando simular o procedimento cirúrgico para o tratamento de deslocamento de retina;
2. estudar, modelar matematicamente e incorporar no modelo a técnica de hipertermia, elevação da temperatura, pela aplicação de um campo magnético alternado usada como medida terapêutica em células cancerígenas;
3. paralelizar a metodologia desenvolvida no presente trabalho e incorporara-la numa versão paralela da implementação que serviu como base deste trabalho;
4. desenvolver uma triangularização adaptativa com triângulos acutângulos geodésicos (“curvos”);
5. incorporar na metodologia a contribuição de um elemento surfactante solúvel;
6. e estudar, modelar matematicamente e incorporar no modelo a configuração de uma gota de ferrofluido apoiada na presença de surfactante.

## Apêndice A

# Desenvolvimento da equação de transporte de surfactante insolúvel generalizado para uma curva ou superfície deformável

### A.1 Variedades Riemannianas

Um subconjunto  $M \subset \mathbb{R}^n$  é chamado uma variedade de dimensão  $m \geq 0$  se, para cada ponto  $p \in M$ , existe uma função suave (suave é usada aqui como sinônimo de classe  $C^\infty$ ) tal que

$$\begin{aligned} \varphi : V &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ \alpha = (\alpha^1, \dots, \alpha^m) &\mapsto (\varphi_1, \dots, \varphi_n) \end{aligned}$$

definida num conjunto aberto  $V \subset \mathbb{R}^m$  satisfazendo:

1.  $\varphi$  é um homeomorfismo de  $V$  numa vizinhança aberta  $W$  de  $p$  em  $M$ ;

2. Para cada  $\alpha$  de  $V$ , a matriz  $m \times n$  
$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_1(\alpha)}{\partial \alpha^1} & \dots & \frac{\partial \varphi_n(\alpha)}{\partial \alpha^1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \varphi_1(\alpha)}{\partial \alpha^m} & \dots & \frac{\partial \varphi_n(\alpha)}{\partial \alpha^m} \end{pmatrix}$$

tem posto  $m$ . Em outras palavras, escrevendo-se  $\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^i} = (\frac{\partial \varphi_1(\alpha)}{\partial \alpha^i}, \dots, \frac{\partial \varphi_n(\alpha)}{\partial \alpha^i})$ ,  $i = 1, \dots, m$ , os  $m$  vetores  $\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^1}, \dots, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^m}$  de  $\mathbb{R}^n$  são linearmente independentes (Milnor e Stasheff, 1974).

Aqui,  $\varphi^{-1} : W \rightarrow V$  é chamado sistema de coordenadas local no ponto  $p$ .  $M$  é chamado fechado ou aberto, se sua topologia é fechada ou aberta respectivamente. A função  $f : M \rightarrow \mathbb{R}$  é chamada suave no ponto  $p$  de  $M$  se, para todo sistema de coordenadas local,  $\varphi^{-1} : W \rightarrow V$ , no ponto  $p$ ,  $f \circ \varphi : V \rightarrow \mathbb{R}$  é suave em  $\varphi^{-1}(p)$ . E  $f$  é chamada uma função suave em  $M$  se  $f$  é suave em cada ponto de  $M$ . Um vetor  $v$  de  $\mathbb{R}^n$  é tangente a  $M$ , no ponto  $p$ , se  $v$  pode ser expresso como o vetor velocidade de um certo caminho suave por  $p$  pertencente a  $M$ . Então  $\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^1}, \dots, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^m}$  são  $m$  vetores tangentes em  $p$  e todo vetor tangente em  $p$  pode ser escrito como uma combinação linear desses vetores. O conjunto de todos os vetores tangente em  $p$ :

$$T_p M = \left[ \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^1}, \dots, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^m} \right] \subset \mathbb{R}^n$$

é chamado o espaço tangente de  $M$  em  $p$ . O grupo tangente  $TM$  de  $M$  é um subconjunto de  $M \times \mathbb{R}^n$  satisfazendo:  $TM = (p, v) \in M \times \mathbb{R}^n | v \in T_p M$ . Um campo de vetores tangentes é uma seção de intersecção do grupo tangente  $TM$ , o qual é definido pela aplicação contínua  $s : M \rightarrow TM$  tal que  $\Pi \circ s(p) = p$ , na qual  $\Pi : TM \rightarrow M : (p, v) \rightarrow p$ .

Um subconjunto de Riemann  $(M, g)$  é uma variedade com uma métrica suave  $g$  definida em cada espaço tangente  $T_p M$  de  $M$  com o produto interno:

$$g_p : T_p M \times T_p M \rightarrow \mathbb{R}$$

$$(v, w) \mapsto g_p(v, w).$$

Num sistema de coordenadas local  $\varphi^{-1} : W \rightarrow V$  em  $p$ , escreve-se  $\frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^1}, \dots, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^m}$ , então  $g$  pode ser localmente representado como uma matriz simétrica  $m \times m$  definida positiva

$$g(\alpha) = \begin{pmatrix} g_{11}(\alpha) & \dots & g_{1m}(\alpha) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{m1}(\alpha) & \dots & g_{mm}(\alpha) \end{pmatrix}, \text{ na qual } g_{ij} = g_p \left( \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^i}, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^j} \right), i, j = 1, \dots, m.$$

Tipicamente, desde que  $M$  seja um subconjunto de  $\mathbb{R}^n$ , existe uma métrica natural  $g^{Ind}$  em  $M$ , induzida de  $\mathbb{R}^n$ , dada por:

$$g_p^{Ind}(\partial_{\alpha^i}, \partial_{\alpha^j}) = \left( \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^i}, \frac{\partial \varphi(\alpha)}{\partial \alpha^j} \right)_{\mathbb{R}^n} \quad (\text{A.1})$$

na qual  $(\cdot, \cdot)_{\mathbb{R}^n}$  é o produto interno usual do  $\mathbb{R}^n$ .

Grande parte dos subconjuntos, visíveis no mundo físico e de interesse no presente estudo, são subconjuntos de  $\mathbb{R}^2$  e do  $\mathbb{R}^3$  com métrica induzida. Portanto seja  $(M, g)$  uma variedade fechada Riemanniana de dimensão  $m = 1, 2$ . Para qualquer ponto  $p$  de  $M$  e seu sistema de coordenadas locais  $\varphi_p : V_p \rightarrow W_p$ , o divergente superficial é dado por

$$\nabla_s \cdot \mathbf{U} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3, \quad (\text{A.2})$$

onde  $\mathbf{U}$  é um vetor do  $\mathbb{R}^{m+1}$  e  $\mathbf{b}_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , são

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{|G|^{1/2}} \left\{ \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial \alpha^i} \left( |G|^{1/2} \sum_{j=1}^m g^{ij} \mathbf{U} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha^j} \right) \right\},$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{1}{|G|^{1/2}} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \left\{ \left[ \frac{\partial}{\partial \alpha^i} (|G|^{1/2} g^{ij}) \mathbf{U} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha^j} \right] \right\},$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{1}{|G|^{1/2}} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \left\{ \left[ |G|^{1/2} g^{ij} \mathbf{U} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^i} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha^j} \right) \right] \right\},$$

o gradiente superficial por

$$\nabla_s f = \sum_{i,j=1}^m g^{ij} \frac{\partial f}{\partial \alpha^i} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha^j},$$

e a operador Laplaciano de Beltrami por

$$\nabla_s^2 f = \frac{1}{|G|^{1/2}} \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial \alpha^i} \left( |G|^{1/2} \sum_{j=1}^m g^{ij} \frac{\partial f}{\partial \alpha^j} \right),$$

na qual  $(g^{ij})$  é a matriz inversa de  $(g_{ij})$  e  $G = \det(g_{ij})$ . Com exceção do operador divergente, que foi alterado da sua formulação original da literatura, os conceitos acima apresentados podem ser encontrados em diversos livros de geometria diferencial, por exemplo do Carmo (1976); Milnor e Stasheff (1974); Rosenberg (1997).

## A.2 Equação de transporte de Surfactante

Considere uma interface  $M$ , descrita por uma variedade riemanniana de dimensão  $m$  (curva para  $m = 1$  e superfície para  $m = 2$ ), imersa num escoamento incompressível, de dimensão  $m + 1$ , de um fluido no domínio  $\Omega$ . A interface é deformável e move-se com o fluido. Seguindo [Huang et al. \(2008\)](#); [Lai et al. \(2008\)](#); [Stone \(1990\)](#), o surfactante é assumido insolúvel e está aderido na interface, ou seja, não há troca de massa através da interface. Uma descrição Lagrangiana é utilizada,  $M(t) \doteq \{\mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t) | \boldsymbol{\alpha} \in \Sigma_0\}$ , na qual  $\Sigma_0$  é um subconjunto compacto do espaço de parâmetros Lagrangiano, para a evolução da interface deformável no tempo,  $t$ , utilizada na resolução da equação de transporte de surfactante. Dado que a interface é assumida imersa num fluido incompressível e move-se com o campo de velocidade local tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\boldsymbol{\alpha}, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(\boldsymbol{\alpha}, t), \quad (\text{A.3})$$

onde  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1)$  para  $m = 1$  e  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2)$  para  $m = 2$ .

**Lema A.2.1.** *A derivada material no tempo de  $|G|^{1/2}$  é dada por:*

$$\frac{d}{dt}|G|^{1/2} = (\nabla_s \cdot \mathbf{U})|G|^{1/2}$$

*Demonstração (do Lema A.2.1):* Dado que

$$\frac{d}{dt}|G|^{1/2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial G}{\partial t} / |G|^{1/2} \right), \quad (\text{A.4})$$

se  $m = 1$  denota-se  $G = \det(g_{ij}) = \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2$ , então, comutando derivadas, usando a equação (A.3) e a regra da cadeia, obtém-se:

$$\frac{\partial G}{\partial t} = 2 \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) \cdot \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} = 2 \frac{\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} \cdot \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|, \quad (\text{A.5})$$

substituindo a equação (A.5) em (A.4) e usando a definição (A.2) do operador divergente sobre a variedade, o lema é demonstrado para  $m = 1$ ,

$$\frac{\left| \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^1} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} \left[ \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2} \mathbf{U} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) - \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2} \right) \mathbf{U} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} - \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2} \mathbf{U} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \right] = (\nabla_s \cdot \mathbf{U})|G|^{1/2}.$$

Se  $m = 2$  denota-se  $G = \det(g_{ij}) = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \\ \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \end{vmatrix}$ , então, no ponto  $(\boldsymbol{\alpha}, t)$ , comutando

derivadas, usando a equação (A.3) e a regra da cadeia, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^j} \right) &= \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^i} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^j} \right) + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^j} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^i} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^i} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^j} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^j} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^i} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^j} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^i} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^i} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^j} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Aplicando as propriedades usuais dos determinantes e usando a equação (A.6), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(G) = & \left| \begin{array}{cc} \left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} + \frac{\partial U}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) & \left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} + \frac{\partial U}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \\ \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \end{array} \right| + \\ & + \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} & \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \\ \left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} + \frac{\partial U}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) & \left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} + \frac{\partial U}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \end{array} \right| \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

substituindo a equação (A.7) em (A.4) e usando a definição (A.2) do operador divergente sobre a

$$\begin{aligned} \text{variedade, o lema é demonstrado para } m = 2, \text{ na qual } \mathbf{W} = & \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \\ & \left\{ \frac{\left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^1} \right) \cdot \left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)} + \frac{\left( \frac{\partial U}{\partial \alpha^2} \right) \cdot \left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)} \right\} \mathbf{W} = \\ & = \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left( \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2 \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} + \frac{\left( -\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \right] \right\} + \\ & + \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha^2} \left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left( \frac{\left( -\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} + \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \right] \right\} + \\ & - \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \left\{ \left[ \frac{\partial}{\partial \alpha^2} \left( \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \right) \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\left( -\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right)}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \right) \mathbf{U} \right] \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right\} + \\ & - \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \left\{ \left[ \left( \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2 \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{X}}{\partial (\alpha^1)^2} + \frac{\left( -\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^1} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \right) \right] \right\} + \\ & - \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \left\{ \left[ \left( \frac{\left( -\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right) \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha^2} \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) + \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \mathbf{U}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{X}}{\partial (\alpha^2)^2} \right) \right] \right\} = (\nabla_s \cdot \mathbf{U})|G|^{1/2} \end{aligned}$$

□

Seja  $\Gamma$  a concentração de surfactante (massa de surfactante por unidade de área se  $m = 2$  ou massa de surfactante por unidade de comprimento se  $m = 1$ ). A dedução da equação governante de surfactante  $\Gamma$  inicia-se pela aplicação da lei de conservação de massa, para uma região  $M(0)$  da interface no tempo  $t = 0$  submetida a uma velocidade de escoamento prescrita. A lei é tal que para todo  $M(t)$

$$\frac{d}{dt} \int_{M(t)} \Gamma(y, t) dS = - \int_{\partial M(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\mu} ds,$$

na qual,  $y \in \mathbb{R}^m$ ,  $\partial M(t)$  é a fronteira de  $M(t)$  (uma curva se  $m = 2$  e pontos extremos de uma



curva se  $m = 1$ ) e  $\boldsymbol{\mu}$  é a conormal em  $\partial M(t)$ . Assim,  $\boldsymbol{\mu}$  é a normal unitária à  $\partial M(t)$  apontando para o exterior de  $M(t)$  e tangente à interface ( $dS$  é um elemento de área se  $m = 2$  ou um elemento de comprimento da curva se  $m = 1$ , enquanto  $ds$  é um elemento de comprimento para  $m = 2$  e indica uma restrição de  $\mathbf{q}$  aos extremos de uma curva se  $m = 1$ ). O fluxo sobre a superfície é denotado por  $\mathbf{q}$ . Observe que a componente normal de  $\mathbf{q}$  à  $M$  não contribue para o fluxo, então pode-se assumir que  $\mathbf{q}$  é um vetor tangente.

Utilizando-se de uma versão do teorema da divergência de Gauss, descrita em [Weatherburn \(1939\)](#)

$$\int_{M(t)} \nabla_s \cdot \mathbf{q} dS = \int_{\partial M(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\mu} ds + \int_{M(t)} (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS,$$

tal que  $\mathbf{n}$  é a normal unitária à superfície, tem-se que

$$\int_{\partial M(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\mu} ds = \int_{M(t)} \nabla_s \cdot \mathbf{q} dS + \int_{M(t)} (-\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{M(t)} \nabla_s \cdot \mathbf{q} dS. \quad (\text{A.8})$$

Por outro lado, considerando a interface em  $t=0$  ( $M(0)$ )

$$\frac{d}{dt} \int_{M(t)} \Gamma(y, t) dS = \frac{d}{dt} \int_{M(0)} \Gamma(\mathbf{X}(x, t), t) |G|^{1/2} d\Upsilon,$$

na qual  $d\Upsilon$  é o elemento de área no sistema de coordenadas local ( $d\Upsilon = d\alpha^1$  para  $m = 1$  e  $d\Upsilon = d\alpha^1 d\alpha^2$  para  $m = 2$ ) e  $G = \det(g_{ii})$ . Fixada a interface para o tempo inicial, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{M(t)} \Gamma(y, t) dS = \int_{M(0)} \frac{D\Gamma}{Dt} |G|^{1/2} d\Upsilon + \int_{M(0)} \Gamma \frac{d}{dt} |G|^{1/2} d\Upsilon$$

na qual a derivada material é definida de maneira usual  $\frac{D\Gamma}{Dt} = \frac{\partial \Gamma}{\partial t} |_{\mathbf{X}} + \mathbf{U} \cdot \nabla \Gamma$  e o sobrescrito  $\mathbf{X}$  denota que a derivada é tomada com respeito ao tempo, enquanto  $\mathbf{X}$  é fixado. Buscando simplificar a notação, o sobrescrito será omitido no restante do trabalho. Usando o lema A.2.1 e combinando as integrais acima

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{M(t)} \Gamma(y, t) dS &= \int_{M(0)} \left( \frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \right) |G|^{1/2} d\Upsilon, \\ \frac{d}{dt} \int_{M(t)} \Gamma(y, t) dS &= \int_{M(t)} \left( \frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \right) dS. \end{aligned}$$

Dado que  $M(t)$  é arbitrário e usando a equação (A.8), tem-se

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = -\nabla_s \cdot \mathbf{q}.$$

Tomando  $\mathbf{q}$  como o fluxo difusivo, dado pela *lei Fick* para a difusão, descrita em [Pozrikidis \(2011\)](#), com tensor difusão  $\mathcal{D}$ , definido no espaço tangente à interface

$$\mathbf{q} = -\mathcal{D} \nabla_s \Gamma,$$

tem-se

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = \nabla_s \cdot (\mathcal{D} \nabla_s \Gamma).$$

Considerando-se ainda que o tensor difusão é isotrópico com coeficiente de difusão superficial  $D_s$ , a equação de transporte de surfactante é apresentada a seguir

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = D_s \nabla_s^2 \Gamma. \quad (\text{A.9})$$

É possível comparar a equação obtida com alguns trabalhos da literatura. Usando o fato que o transporte de surfactante ocorre apenas ao longo da interface e **não** é transportado através da interface, tem-se que  $\frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{n}} = 0$ , então a equação acima é reescrita como

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla_s \Gamma + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = D_s \nabla_s^2 \Gamma.$$

A contribuição física da distribuição de surfactantes ao longo da interface é provindo de duas partes, advecção do fluido ( $\mathbf{U} \cdot \nabla_s \Gamma$ ) e alongamento da interface ( $\Gamma \nabla_s \cdot \mathbf{U}$ ) (Huang *et al.*, 2008). Decompondo a velocidade  $\mathbf{U}$  em uma componente tangente  $U_s$  e outra normal  $(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$  à interface, teremos então

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\Gamma \mathbf{U}_s) + \Gamma(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})(\nabla_s \cdot \mathbf{n}) = D_s \nabla_s^2 \Gamma. \quad (\text{A.10})$$

A equação (A.10) é a mesma obtida por Stone (1990) e por Huang *et al.* (2008) com  $\mathbf{X}$  fixado. A dedução realizada até o momento utiliza a derivada material com  $\mathbf{X}$  fixado, como em Stone (1990). Já Wong *et al.* (1996), manteve os parâmetros  $(\alpha^1, \alpha^2)$  fixos, a diferença do primeiro para o segundo pode ser percebida quando definimos  $\Gamma(\mathbf{X}(\alpha^1, \alpha^2, t), t) = \hat{\Gamma}(\alpha^1, \alpha^2, t)$ . Aplicando novamente a derivada material, obtém-se:

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma \nabla_s \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} + \hat{\Gamma} \nabla_s \cdot \mathbf{U}$$

O lado direito da equação acima é exatamente a equação desenvolvida por Wong *et al.* (1996) sem o termo difusivo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{M(0)} \hat{\Gamma}(\alpha^1, \alpha^2, t) |G|^{1/2} d\Upsilon &= \int_{M(0)} \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} |G|^{1/2} d\Upsilon + \int_{M(0)} \hat{\Gamma} \frac{d}{dt} |G|^{1/2} d\Upsilon \\ &= \int_{M(0)} \left( \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} + \hat{\Gamma} (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \right) |G|^{1/2} d\Upsilon. \end{aligned}$$

A derivada no tempo aqui é tomada fixando o(s) parâmetro(s) ( $\alpha^1$  para  $m=1$  ou  $\alpha^1$  e  $\alpha^2$  para  $m=2$ ).

### A.3 Adimensionalização da equação de transporte de surfactante

A equação de transporte de surfactante é adimensionalizada utilizando-se as variáveis

$$\bar{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}}{L_c}, \quad \bar{\mathbf{U}} = \frac{\mathbf{U}}{U_c}, \quad \bar{t} = \frac{t}{T_c}, \quad \bar{\Gamma} = \frac{\Gamma}{\Gamma_c},$$

onde  $\bar{\mathbf{X}} = (\bar{X}, \bar{Y}, \bar{Z})$  e  $\bar{\mathbf{U}} = (\frac{\partial \bar{\mathbf{X}}}{\partial \bar{x}}, \frac{\partial \bar{\mathbf{X}}}{\partial \bar{y}}, \frac{\partial \bar{\mathbf{X}}}{\partial \bar{z}})$ ,  $L_c$  é o comprimento característico dado pelo raio  $a$  da gota esférica não deformada,  $U_c$  é a velocidade característica, cujo valor adotado nesse trabalho foi de  $U_c = \sigma_0/\eta_c$ , sendo  $\sigma_0$  a tensão superficial da interface sem surfactante e  $\eta_c$  a viscosidade da fase contínua,  $T_c$  é o tempo característico, calculado pela razão do produto do raio inicial de uma gota pela densidade da fase contínua pela tensão superficial, isto é,  $T_c = (a\eta_c)/\sigma_0$  e  $\Gamma_c$  é a concentração característica de surfactante, cujo valor é determinado pela concentração de uma distribuição uniforme de surfactante na interface.

Suprimindo-se a barra das variáveis, a equação (A.9) é reescrita na forma adimensional como

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma(\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = \frac{1}{\zeta} \nabla_s^2 \Gamma.$$

onde  $\zeta = (a\sigma_0)/(\eta_c D_s) = Pe_s/Ca_0$ . Sendo  $Pe_s = (a^2\dot{\gamma})/D_s$  o número de Péclet superficial, com  $\dot{\gamma}$  representando a razão de cisalhamento (deformação). O número de capilaridade  $Ca_0 = (a\eta_c\dot{\gamma})/\sigma_0$ , correspondente para uma interface limpa (sem surfactante). Onde  $\zeta$  é um parâmetro que controla o papel relativo da difusão e da convecção de transporte de surfactante sobre a interface. Um valor pequeno de  $\zeta$  corresponde a um transporte de surfactante sobre a interface com dominância da difusão. Enquanto um grande valor de  $\zeta$  indica que a maior quantidade de surfactante é transportada por advecção.

#### A.4 Operador Divergente sobre uma curva ou superfície

Nessa seção, a generalidade da definição do operador divergente sobre uma curva ou uma superfície é enfatizada, além de evidenciar a consistência do mesmo, com algumas das referências sobre o assunto. Para  $m = 1$ , ou seja, uma curva imersa no  $\mathbb{R}^2$ , temos em [Lai et al. \(2008\)](#) o operador divergente definido como a seguir

$$\nabla_s \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau} \cdot \tau = \frac{\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} \cdot \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}, \quad (\text{A.11})$$

onde  $\tau = \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}$  é descrita como a tangente unitária. A constatação da equivalência dos operadores para  $m = 1$  é imediata quando as equações (A.5) e (A.11) são comparadas. Para  $m = 2$ , ou seja, uma superfície imersa no  $\mathbb{R}^3$ , [Huang et al. \(2008\)](#) usa a seguinte definição de operador divergente

$$\nabla_s \cdot \mathbf{U} = \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau_1} \cdot \mathbf{b}_2 + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau_2} \cdot \mathbf{b}_1 \right) \frac{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}, \quad (\text{A.12})$$

na qual  $\tau_1 = \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|}$ ,  $\tau_2 = \frac{\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|}$ ,  $\mathbf{b}_1 = \frac{\left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)}$ ,  $\mathbf{b}_2 = \frac{\left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)}$ ,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau_1} \cdot \mathbf{b}_2 = \left( \frac{\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^1}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|} \right) \cdot \frac{\left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)},$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tau_2} \cdot \mathbf{b}_1 = \left( \frac{\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \alpha^2}}{\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right|} \right) \cdot \frac{\left[ \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right|^2 \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} - \left( \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right) \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right]}{\left( \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^1} \wedge \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \alpha^2} \right| \right)}.$$

A equivalência entre o operador descrito no presente trabalho e operador definido em [Huang et al. \(2008\)](#) pode ser averiguada com uma simples comparação, neste caso, entre a equação (A.8) e a equação (A.12). Além disso, [Huang et al. \(2008\)](#) demonstra a consistência de seu operador divergente com o de [Stone \(1990\)](#), desta forma, é possível afirmar que o operador do presente trabalho também é consistente com o operador definido em [Stone \(1990\)](#).

## Apêndice B

### Dedução da força interfacial

O “salto” na força superficial através da interface de separação dos fluidos,  $\Delta \mathbf{f} = -\mathbf{F}_s$ , presente na equação de força singular (2.11) é desenvolvido a seguir. Como discutido em [Pozrikidis \(2011\)](#), considerando-se que a massa da camada de interface é desprezível, realiza-se um balanço de forças sobre uma pequena região arbitrária  $D$ , que é contornada pela curva  $\partial D$ ,

$$-\int_D \mathbf{F}_s dS + \oint_{\partial D} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} ds = \int_D \Delta \mathbf{f} dS + \oint_{\partial D} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} ds = 0, \quad (\text{B.1})$$

onde  $\mathbf{t}$  é um vetor tangente unitário à  $\partial D$ ,  $\mathbf{n}$  é a normal unitária à região superficial  $D$  ( $ds$  é um elemento de comprimento da curva e  $dS$  é um elemento de área),  $\mathbf{t} \times \mathbf{n} \equiv \mathbf{b}$  é o vetor binormal, definido para todo ponto de  $\partial D$ , isto é,  $\mathbf{b}$  é tangente à superfície  $D$  e é normal à curva  $\partial D$ , apontando para o exterior da região limitada por  $\partial D$ , como representado na Figura B.1. Uma força por unidade de comprimento de magnitude  $\sigma$  e direção  $\mathbf{b}$  age em todo ponto ao longo de  $\partial D$  para esticar a seção superficial  $D$ . Tomando-se  $\mathbf{v}$  um campo vetorial continuamente diferenciável e utilizando-se uma

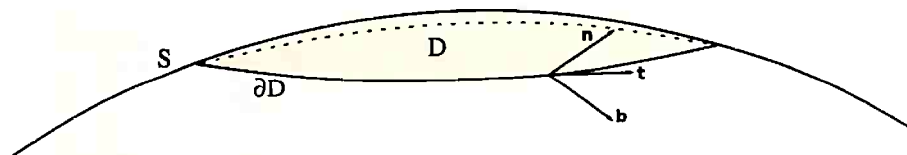


Figura B.1: A tensão superficial agindo ao longo de uma seção da interface  $S$ .

versão do *Teorema da Divergência de Gauss* para uma superfície suave ([Weatherburn, 1939](#))

$$\int_D \nabla_s \cdot \mathbf{v} dS = \oint_{\partial D} \mathbf{v} \cdot \mathbf{t} \times \mathbf{n} ds + \int_D (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (\text{B.2})$$

onde  $\nabla_s$  é o operador gradiente superficial (Apêndice A). Estendendo-se suavemente o domínio de definição da tensão superficial e do vetor normal à superfície para todo o espaço tridimensional. Tomando-se  $\mathbf{v} = \sigma \mathbf{c}$  em (B.2) para toda função escalar  $\sigma$  definida na superfície e todo vetor constante  $\mathbf{c}$  tem-se

$$\int_D \nabla_s \sigma \cdot \mathbf{c} dS = \oint_{\partial D} \sigma \mathbf{c} \cdot \mathbf{t} \times \mathbf{n} ds + \int_D (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \sigma \mathbf{c} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (\text{B.3})$$

Dado que (B.3) é verificada para todo vetor constante  $\mathbf{c}$ , segue que

$$\int_D \nabla_s \sigma dS = \oint_{\partial D} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} ds + \int_D (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) \sigma \mathbf{n} dS, \quad (\text{B.4})$$

da expressão acima, rearranjando os termos, tem-se que

$$\oint_{\partial D} \sigma \mathbf{t} \times \mathbf{n} \, ds = \int_D (\nabla_s \sigma - \kappa \sigma \mathbf{n}) \, dS, \quad (\text{B.5})$$

onde  $\kappa = \nabla_s \cdot \mathbf{n}$ . Note que  $\kappa$  não é a curvatura média usual.

Combinando-se a expressão resultante com (B.1), obtém-se

$$\int_D \mathbf{F}_s \, dS = \int_D (\nabla_s \sigma - \kappa \sigma \mathbf{n}) \, dS, \quad (\text{B.6})$$

tomando-se o limite e reduzindo-se  $D$  a um ponto, a equação desejada é obtida

$$\mathbf{F}_s = \nabla_s \sigma - \kappa \sigma \mathbf{n}. \quad (\text{B.7})$$

## Apêndice C

# Força de corpo magnética

### C.1 Definição de campo magnético e apresentação de unidades

Quando um ímã é imerso ou se aproxima de um fluido magnético, o fluido é atraído, como se fosse pedacinhos de ferro, especialmente em certos lugares chamados *pólos*, os quais geralmente se localizam nas extremidades de um ímã. O conceito de pólos é útil, apesar de até hoje, nenhum pólo magnético isolado foi detectado na natureza. Charles Coulomb, em 1785, determinou como resultado de observações experimentais que tais polos repelem e atraem com uma força que é proporcional ao produto da carga dos polos e inversamente proporcional ao quadrado da distância entre eles. Admitindo polos magnéticos pontuais de “cargas magnética” ou “massas magnética”  $p$  e  $p'$  separados no vácuo por uma distância  $r$ , a força magnética entre os mesmos é dada por (Ramsey, 2009, p. 182) (Bitter *et al.*, 1937, p. 3) (Rosensweig, 1997, p. 9)

$$p p' / 4\pi\mu_0 r^2, \quad (\text{C.1})$$

com a direção da força determinada pela linha que conecta os dois pólos.

Se  $p'$  é um polo de carga magnética positiva unitária, a força agindo nele é definida como o *campo magnético*  $\mathbf{H}$ . Desta maneira, ao redor de um polo pontual de carga magnética  $p$  o campo magnético é

$$\mathbf{H} = \frac{p\hat{\mathbf{r}}}{4\pi\mu_0 r^2} = \frac{p\mathbf{r}}{4\pi\mu_0 r^3}, \quad (\text{C.2})$$

na qual  $\mathbf{r}$  é o vetor posição cuja direção é determinada pelo segmento que liga os pólos de carga magnética  $p$  e  $p'$ , e  $\hat{\mathbf{r}} \doteq \mathbf{r}/r$  é um vetor unitário de mesma orientação de  $\mathbf{r}$ . O valor da constante de proporcionalidade  $1/4\pi\mu_0$  na equação (C.2) depende do sistema de unidades utilizado. O presente trabalho adota o “Sistema Internacional de Unidades”, SI, no qual distâncias são mensuradas em metros ( $m$ ), massa em quilogramas ( $kg$ ), tempo em segundos ( $s$ ) e corrente elétrica em Amperes ( $A$ ). O campo magnético  $\mathbf{H}$  tem unidades de Ampere por metro ( $A \cdot m^{-1}$ ). O parâmetro  $\mu_0$  é a chamada permeabilidade no vácuo e tem o valor de  $4\pi \times 10^{-7} H \cdot m^{-1}$ , com  $H$  neste caso indicando a unidade Henry. A força (C.1) é mensurada em Newtons ( $N$ ).

A noção de campo magnético  $\mathbf{H}$  simplifica e evita a descrição detalhada das condições externas. Assim, ao invés de relatar cuidadosamente para um dado experimento que o teste foi conduzido a uma determinada distância e orientação com a utilização de um ímã construído de acordo com certas especificações, é possível dizer apenas que o o aparato experimental estava alocado em determinada posição num campo magnético  $\mathbf{H}$ .

No SI, a “indução magnética  $B$ ” (em Tesla) é definida de tal maneira que no vácuo  $B = \mu_0 H$ , sendo  $H$  a magnitude do campo magnético  $\mathbf{H}$ . Usando a equação (C.2) e a definição de  $B$ , a magnitude do campo indução num pólo de carga magnética  $p$  é dado por  $B = p/4\pi r^2$ . O campo  $B$  pode ser retratado como linhas de indução. Num campo uniforme  $B$  de intensidade unitária, dizemos que uma linha (ou Weber,  $Wb$ ) atravessa cada metro quadrado da superfície perpendicular. Assim  $B$  tem unidades de Webers por metro quadrado ( $Wb \cdot m^{-2}$ ), também conhecida como Teslas ( $T$ ).



Unidades alternativas para  $\mu_0$  são Newton por Ampère quadrado ( $N \cdot A^{-2}$ ) e para a carga magnética de um pólo, Tesla por metro quadrado ( $T \cdot m^{-2}$ ). Uma esfera circundante a um pólo é atravessada por um número total de linhas igual a  $4\pi r^2 B = p$ .

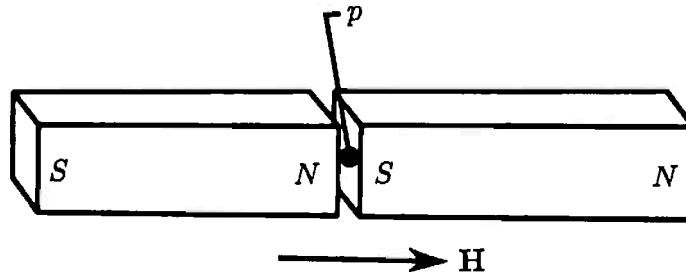


Figura C.1: Barra magnética contendo uma abertura transversal estreita.

A “intensidade de magnetização”  $M$  denota o estado de polarização de um material magnetizado. Se um pólo magnético de carga magnética  $p$  tem uma área  $A$  ( $m^2$ ) a intensidade de magnetização é definida como  $M \doteq p/A\mu_0 = \rho_s/\mu_0$ , sendo  $\rho_s$  a densidade superficial de pólos magnéticos. Considere, como na Figura C.1, uma barra ferromagnética contendo uma fenda muito estreita com orientação transversal à direção de magnetização. Pólos aparecem em ambas as faces da fenda e o campo magnético na superfície da fenda é a superposição do campo emanado dos pólos norte, aparecendo na superfície esquerda da fenda e do campo dos pólos sul, localizados na superfície oposta da fenda. Por causa que uma linha de indução emana de cada pólo norte, por simetria  $p/2A$  linhas atravessam uma área unitária da fenda perpendicular devido a presença de pólos na face norte, e a face sul contribui com  $p/2A$  linhas adicionais, com um total de  $p/A = \mu_0 M$  linhas. O campo magnético  $H$ , responsável pela magnetização, contribui com um adicional de  $\mu_0 H$  para a indução magnética da fenda, então a magnitude total do campo indução na fenda é igual a  $B = \mu_0(H + M)$ , se a fenda é fechada  $B$  permanece inalterado. As linhas do campo  $B$  são laços (*loops*) contínuos que emanam da extremidade norte da barra e entram na extremidade sul e no interior da barra, a direção do campo  $B$  é de sul para norte.

Nesta seção  $B$  e  $M$  foram introduzidos como quantidades escalares. Em geral, essas variáveis de campo possuem além de magnitude uma orientação, por isso são vetores na natureza. Assim,  $B$  é a magnitude do vetor  $\mathbf{B}$ ,  $M$  a do vetor  $\mathbf{M}$  e como citado anteriormente  $H$  é a magnitude do vetor campo magnético  $\mathbf{H}$ . Tais vetores estão relacionados por

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}). \quad (\text{C.3})$$

## C.2 Força magnética dipolar

Uma expressão geral para a força magnética num corpo magnetizado, para um fluido isotérmico é apresentada a seguir. Note que não tratamos da distribuição de tensões internas ao corpo, que querer um adequado estudo termodinâmico, uma descrição detalhada nesse aspecto pode ser encontrada no Capítulo 4 de [Rosensweig \(1997\)](#).

Considere um pequeno volume cilíndrico de uma substância magnetizada e polarizada, com eixo axial  $\mathbf{d}$  alinhado com o vetor magnetização  $\mathbf{M}$  (Figura C.2). O material é submetido a um campo magnético  $\mathbf{H}_0$ , pólos de densidade magnética  $\rho_s = \mu_0 M$  aparecem em igual número e polarização oposta nas extremidades de área  $A_d$ . O volume  $\delta V$  do elemento é  $A_d d$ . O campo magnético aplicado  $\mathbf{H}_0$  pode ser tomado como a força num polo de carga unitária e assim a força experimentada pelo volume do elemento é

$$-\mathbf{H}_0 \rho_s A_d + (\mathbf{H}_0 + \delta \mathbf{H}_0) \rho_s A_d = \delta \mathbf{H}_0 \rho_s A_d, \quad (\text{C.4})$$

na qual  $\delta \mathbf{H}_0$  é a variação em  $\mathbf{H}_0$  ao longo da direção de  $\mathbf{d}$ . Assim  $\delta \mathbf{H}_0 = (\mathbf{d} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0 = (d/M)(\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{H}_0$ ,

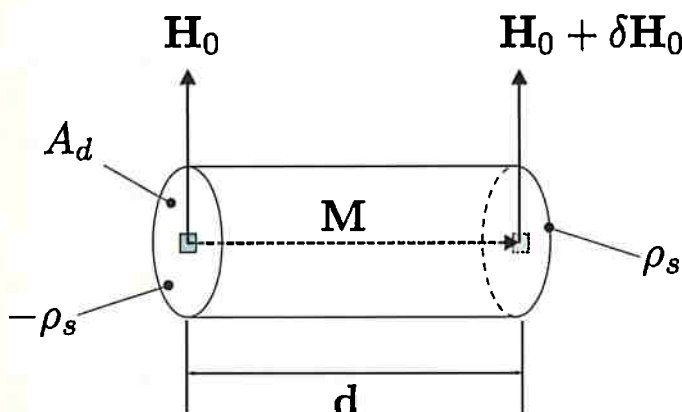


Figura C.2: Pequeno elemento de volume magnetizado e polarizado.

e a “densidade de força de Kelvin” (Landau e Lifshitz, 1984, p. 128) (Rosensweig, 1997) dada por

$$\text{densidade de força} = \mu_0(\mathbf{M} \cdot \nabla)\mathbf{H}_0. \quad (\text{C.5})$$

Note que  $\mu_0\mathbf{M}$  representa o vetor momento por unidades de volume, dado que a definição de “momento de dipolo”  $\mathbf{m}$  é

$$\mathbf{m} \doteq \rho_s A_d \mathbf{d} = \mu_0 \mathbf{M} A_d d \quad (\text{C.6})$$

e  $A_d d$  é o volume do elemento.

### C.3 Equações de Maxwell

As “equações de Maxwell” são um conjunto de quatro equações capaz de descrever grande parte dos fenômenos fundamentais da eletricidade e do magnetismo, sintetizando todo o eletromagnetismo. Foram nomeadas em homenagem ao físico e matemático britânico James Clerk Maxwell (1831-1879) que, em 1864, publicou um trabalho intitulado “Teoria Dinâmica do Campo Eletromagnético” (*A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field*) no qual unificou as pesquisas experimentais em eletricidade e magnetismo de aproximadamente um século.

Apresentamos a seguir as equações de Maxwell na forma integral identificadas pelo índice (a) e diferencial pelo índice (b) (Fleisch, 2008; Machado, 2005a,b; Martins, 1975; Rosensweig, 1997).

#### Lei de Gauss

As equações (C.7) e (C.8) denotam a chamada lei de Gauss, obtida a partir da lei de Coulomb. Tais equações, na forma integral (a), enunciam que cargas elétricas produzem um campo elétrico e o fluxo desse campo passando através de uma superfície fechada qualquer é proporcional a carga total no interior da superfície. Na forma diferencial (b) denotam que a divergência do campo elétrico só não é nulo em regiões com cargas elétricas, apresentando divergência positiva para regiões com cargas positivas e divergência negativa na presença de cargas negativas.

I) para campos macroscópicos,

II) para campos microscópicos,

$$\oint_{\partial V} \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \rho_e dV, \quad (\text{C.7a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e, \quad (\text{C.7b})$$

$$\oint_{\partial V} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_V \rho_e dV, \quad (\text{C.8a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0}. \quad (\text{C.8b})$$

Nas equações acima,  $\oint$  é a integral sobre uma superfície fechada,  $V$  representa o volume limitado pela superfície  $\partial V$ , o vetor  $\mathbf{D}$  ( $\text{C} \cdot \text{m}^{-2}$ ) é o “deslocamento elétrico”,  $\rho_e$  representa a densidade

volumétrica de carga elétrica, dada em Coulomb por metros cúbicos ( $C \cdot m^{-3}$ ),  $\mathbf{E}$  ( $N \cdot C^{-1}$ ) é o vetor intensidade de campo elétrico e  $\epsilon_0$  ( $C^2 \cdot N^{-1} \cdot m^{-2}$ ) é a permissividade elétrica do meio. O conjunto de equações (C.7) é conhecido como “Lei de Gauss para campos macroscópicos” e (C.8) como a “Lei de Gauss para campos microscópicos”.

#### Lei de Gauss magnética para campos macroscópicos e microscópicos

A lei de Gauss magnética, apresentada pelas equações (C.9a)-(C.9b), é uma indicação que pólos magnéticos isolados não podem ser observados na natureza (Rosensweig, 1997). A mesma na forma integral (a) denota que o fluxo magnético total passando através de qualquer superfície fechada é zero. Enquanto que na forma diferencial (b) apresenta que a divergência da indução magnética em qualquer ponto é zero.

$$\oint_{\partial V} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (\text{C.9a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{C.9b})$$

na qual  $\mathbf{B}$  ( $T$ ) é o vetor indução magnética.

#### Lei de Faraday para campos macroscópicos e microscópicos

As equações (C.10a)-(C.10b) denotam a lei da indução magnética eletromagnética de Faraday, que na forma integral (a) evidencia que alterando o fluxo magnético através de uma superfície induz uma força eletromotriz (FEM) em toda fronteira dessa superfície e mudando o campo magnético induz um campo elétrico circulante. Já na forma diferencial (b) apresenta que um campo elétrico circulante é produzido por um campo magnético que varia com o tempo.

$$\oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}, \quad (\text{C.10a})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (\text{C.10b})$$

sendo  $\oint_C$  uma integral de linha ou contorno ao redor de um caminho fechado  $C$ ,  $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$  é a derivada material e  $\int_S$  representa uma integral de superfície.

#### Lei de Ampère-Maxwell

Nas expressões (C.11a)-(C.11b) e (C.12a)-(C.12b) é apresentado uma extensão feita por Maxwell da lei de Ampère. As mesmas na forma integral (a) enunciam que uma corrente elétrica ou um fluxo elétrico variável através de uma superfície produz uma circulação magnética ao redor de toda curva em torno desta superfície. E na forma diferencial (b) expressam que um campo magnético circulante é produzido por uma corrente elétrica e por um campo elétrico que varia com o tempo.

I) para campos macroscópicos,

$$\oint_C \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} + \frac{d}{dt} \int_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S}, \quad (\text{C.11a})$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (\text{C.11b})$$

II) para campos microscópicos,

$$\oint_C \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} + \mu_0 \epsilon_0 \int_S \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{C.12a})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{C.12b})$$

na qual  $\mathbf{H}$  ( $A \cdot m^{-1}$ ) é o vetor intensidade de campo magnético,  $\mathbf{J}$  ( $A \cdot m^{-2}$ ) a densidade de corrente e a permeabilidade magnética do espaço livre é representada por  $\mu_0$ , dada em  $N \cdot A^{-2}$ .

As equações para campos macroscópicos são válidas para qualquer meio e para campos variáveis no tempo, o conjunto dessas equações deve ser acompanhado de equações constitutivas suplementares (Martins, 1975, p. 417).

a) Para o caso dos dielétricos,

$$\mathbf{D} = K\epsilon_0\mathbf{E} \text{ ou } \mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E},$$

com

$$K\epsilon_0 = \epsilon,$$

que é a permissividade elétrica do meio. b) Para o caso dos meios magnéticos,

$$\mathbf{B} = K_m\mu_0\mathbf{H} \text{ ou } \mathbf{B} = \mu\mathbf{H},$$

e

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_v + \mathbf{J}_i \text{ ou } \mathbf{J} = \sigma_e\mathbf{E}$$

sendo  $\mathbf{J}_v$  a densidade de corrente verdadeira,  $\mathbf{J}_i$ , a densidade de corrente de imantação e  $\sigma_e$  ( $(\Omega \cdot m)^{-1}$ ), a condutividade elétrica do meio condutor.

#### C.4 Conceitos preliminares para a dedução da força magnética

A presente Seção apresenta alguns dos conceitos preliminares à dedução da força magnética atuante num escoamento bifásico com um componente fluido magnético.

Para os vetores  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$  e o tensor de segunda ordem  $\mathbf{T} \in M_3(\mathbb{R})$  os seguintes operadores são definidos:

**Produto tensorial de dois vetores**

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 & a_1b_3 \\ a_2b_1 & a_2b_2 & a_2b_3 \\ a_3b_1 & a_3b_2 & a_3b_3 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \end{bmatrix} = \mathbf{a}\mathbf{b}^T.$$

**Derivada direcional de  $\mathbf{b}$  na direção de  $\mathbf{a}$**

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b} = \begin{bmatrix} (\mathbf{a} \cdot \nabla)b_1 \\ (\mathbf{a} \cdot \nabla)b_2 \\ (\mathbf{a} \cdot \nabla)b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \frac{\partial b_1}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial b_1}{\partial x_2} + a_3 \frac{\partial b_1}{\partial x_3} \\ a_1 \frac{\partial b_2}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial b_2}{\partial x_2} + a_3 \frac{\partial b_2}{\partial x_3} \\ a_1 \frac{\partial b_3}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial b_3}{\partial x_2} + a_3 \frac{\partial b_3}{\partial x_3} \end{bmatrix}.$$

**Divergente de um campo tensorial de segunda ordem**

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \left( \mathbf{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \cdot (T_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j) = \mathbf{e}_j \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_i} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{21}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{31}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{32}}{\partial x_3} \\ \frac{\partial T_{13}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{23}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{33}}{\partial x_3} \end{bmatrix},$$

$$\text{na qual } \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Para os vetores  $\mathbf{B}, \mathbf{H} \in \mathbb{R}^3$  são válidas as seguintes identidades:

$$\nabla \cdot (\mathbf{B} \otimes \mathbf{H}) = \mathbf{H}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{H}, \quad (\text{C.13})$$

$$\nabla(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}) = 2(\mathbf{H} \cdot \nabla)\mathbf{H} + 2\mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{H}). \quad (\text{C.14})$$

Verificando a identidade (C.13):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{B} \otimes \mathbf{H}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial(B_1 H_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(B_2 H_1)}{\partial x_2} + \frac{\partial(B_3 H_1)}{\partial x_3} \\ \frac{\partial(B_1 H_2)}{\partial x_1} + \frac{\partial(B_2 H_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(B_3 H_2)}{\partial x_3} \\ \frac{\partial(B_1 H_3)}{\partial x_1} + \frac{\partial(B_2 H_3)}{\partial x_2} + \frac{\partial(B_3 H_3)}{\partial x_3} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} H_1 \left( \frac{\partial B_1}{\partial x_1} + \frac{\partial B_2}{\partial x_2} + \frac{\partial B_3}{\partial x_3} \right) \\ H_2 \left( \frac{\partial B_1}{\partial x_1} + \frac{\partial B_2}{\partial x_2} + \frac{\partial B_3}{\partial x_3} \right) \\ H_3 \left( \frac{\partial B_1}{\partial x_1} + \frac{\partial B_2}{\partial x_2} + \frac{\partial B_3}{\partial x_3} \right) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_1} + B_2 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + B_3 \frac{\partial H_1}{\partial x_3} \\ B_1 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + B_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_2} + B_3 \frac{\partial H_2}{\partial x_3} \\ B_1 \frac{\partial H_3}{\partial x_1} + B_2 \frac{\partial H_3}{\partial x_2} + B_3 \frac{\partial H_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \\ &= \mathbf{H}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{H}. \end{aligned}$$

Verificando a identidade (C.14):

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial(H_1^2 + H_2^2 + H_3^2)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial(H_1^2 + H_2^2 + H_3^2)}{\partial x_2} \\ \frac{\partial(H_1^2 + H_2^2 + H_3^2)}{\partial x_3} \end{bmatrix} \\ &= 2 \begin{bmatrix} H_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_1} + H_2 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + H_3 \frac{\partial H_1}{\partial x_3} \\ H_1 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + H_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_2} + H_3 \frac{\partial H_2}{\partial x_3} \\ H_1 \frac{\partial H_3}{\partial x_1} + H_2 \frac{\partial H_3}{\partial x_2} + H_3 \frac{\partial H_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} H_2 \left( \frac{\partial H_2}{\partial x_1} - \frac{\partial H_1}{\partial x_2} \right) - H_3 \left( \frac{\partial H_1}{\partial x_3} - \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right) \\ H_3 \left( \frac{\partial H_3}{\partial x_2} - \frac{\partial H_2}{\partial x_3} \right) - H_1 \left( \frac{\partial H_2}{\partial x_1} - \frac{\partial H_1}{\partial x_2} \right) \\ H_1 \left( \frac{\partial H_1}{\partial x_3} - \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right) - H_2 \left( \frac{\partial H_3}{\partial x_2} - \frac{\partial H_2}{\partial x_3} \right) \end{bmatrix} \\ &= 2(\mathbf{H} \cdot \nabla)\mathbf{H} + 2\mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{H}). \end{aligned}$$

## Apêndice D

# Adimensionalização das equações de um escoamento com um componente magnético

As equações que compõem o modelo de um escoamento bifásico com um componente magnético utilizando as variáveis são a seguir adimensionalizadas.

Escala	Variável	Característica	Descrição
Comprimento $x_c$	$\mathbf{x} = x_c \mathbf{x}^*$	$x_c = a$	$a$ : raio da gota/bolha não deformada
Velocidade $u_c$	$\mathbf{u} = u_c \mathbf{u}^*$	$u_c = a \dot{\gamma}$	$\dot{\gamma}$ : taxa de deformação (cisalhamento)
Tempo $t_c$	$t = t_c t^*$	$t_c = 1/\dot{\gamma}$	$1/\dot{\gamma}$ : escala de tempo característico
Pressão $p_c$	$p = p_c p^*$	$p_c = (a \dot{\gamma})^2 \rho_0$	$(a \dot{\gamma})^2 \rho_0$ : escala de pressão característica
Densidade $\rho_c$	$\rho(\phi) = \rho_c \rho^*$	$\rho_c = \rho_0$	$\rho_0$ : densidade de referência
Viscosidade $\eta_c$	$\eta(\phi) = \eta_c \eta^*$	$\eta_c = \eta_0$	$\eta_0$ : viscosidade da fase contínua
Campo magnético $H_c$	$\mathbf{H} = H_c \mathbf{H}^*$	$H_c = H_0$	$H_0$ : campo magnético aplicado
Permeabilidade $\mu_c$	$\mu(\phi) = \mu_c \mu^*$	$\mu_c = \mu_0$	$\mu_0$ : permeabilidade magnética no vácuo

Tabela D.1: Escalas para a adimensionalização.

Tabela D.2: Quantidades características utilizadas.

$$\rho(\phi) \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \nabla p + \mathbf{f}_s + \nabla \cdot (\mu \mathbf{H} \otimes \mathbf{H}) \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} \rho_c \rho^* \left( \left( \frac{u_c}{t_c} \right) \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \left( \frac{u_c^2}{x_c} \right) \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^* \right) &= \left( \frac{\eta_c u_c}{x_c^2} \right) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \left( \frac{p_c}{x_c} \right) \nabla p^* + \\ &+ \left( \frac{\sigma}{x_c^2} \right) \mathbf{f} + \left( \frac{\mu_c H_c^2}{x_c} \right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Tomando as quantidades características explicitadas na Tabela D.1, temos

$$\begin{aligned} \rho_0 \rho^* \left( (a \dot{\gamma}^2) \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + (a \dot{\gamma}^2) \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^* \right) &= \left( \frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{a} \right) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - (a \dot{\gamma}^2 \rho_0) \nabla p^* + \\ &+ \left( \frac{\sigma}{a^2} \right) \mathbf{f}_\sigma^* + \left( \frac{\mu_0 H_0^2}{a} \right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$



## D.1 Primeira forma adimensional

A equação é multiplicada pelo fator  $\frac{\rho_0 a^3}{\eta_0^2}$ .

$$\begin{aligned} \left(\frac{a^4 \rho_0^2 \dot{\gamma}^2}{\eta_0^2}\right) \rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= \left(\frac{a^2 \rho_0 \dot{\gamma}}{\eta_0}\right) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \left(\frac{a^4 \rho_0^2 \dot{\gamma}^2}{\eta_0^2}\right) \nabla p^* + \\ &+ \left(\frac{a \rho_0 \sigma}{\eta_0^2}\right) \mathbf{f}_\sigma^* + \left(\frac{H_0^2 a^2 \rho_0 \mu_0}{\eta_0^2}\right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Note que  $La_m = \frac{H_0^2 a^2 \rho_0 \mu_0}{\eta_0^2}$ ,  $La = \frac{a \rho_0 \sigma}{\eta_0^2}$ , e  $Re = \frac{\rho_0 a^2 \dot{\gamma}}{\eta_0}$ , então

$$\begin{aligned} (Re)^2 \rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= (Re) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - (Re)^2 \nabla p^* + \\ &+ (La) \mathbf{f}_\sigma^* + (La_m) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

e finalmente dividindo por  $Re^2$ .

$$\begin{aligned} \rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= \left(\frac{1}{Re}\right) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \nabla p^* + \\ &+ \left(\frac{La}{Re^2}\right) \mathbf{f}_\sigma^* + \left(\frac{La_m}{Re^2}\right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

$$\mathbf{x} = a \mathbf{x}^*, t = (1/\dot{\gamma}) t^*, p = \eta_0 \dot{\gamma} p^*, \mathbf{u} = a \dot{\gamma} \mathbf{u}^*$$

## D.2 Segunda forma adimensional

$$\begin{aligned} (\rho_0 a \dot{\gamma}^2) \rho^* \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{a}\right) \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \left(\frac{p c}{a}\right) \nabla p^* + \\ &+ \left(\frac{\sigma}{a^2}\right) \mathbf{f}_\sigma^* + \left(\frac{H_0^2 \mu_0}{a}\right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Multiplicando a equação por  $\frac{a}{\eta_0 \dot{\gamma}}$ :

$$\begin{aligned} Re \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \left(\frac{p c}{\eta_0 \dot{\gamma}}\right) \nabla p^* + \\ &+ \left(\frac{\sigma}{\eta_0 a \dot{\gamma}}\right) \mathbf{f}_\sigma^* + \left(\frac{H_0^2 \mu_0}{\eta_0 \dot{\gamma}}\right) \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

$$\begin{aligned} Re \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}^*\right) &= \nabla \cdot [\eta^* (\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^T)] - \nabla p^* + \\ &+ \frac{1}{Ca} \mathbf{f}_\sigma^* + \frac{1}{Mn} \nabla \cdot (\mu^* \mathbf{H}^* \otimes \mathbf{H}^*) \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

na qual  $Mn = \frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\mu_0 \mathbf{H}_0^2}$  é número de Mason (magnético).

Note que

$\frac{Ca}{Mn} = \frac{\mu_0 \mathbf{H}_0^2}{\sigma_0 a^{-1}} = Bo_m$  que é o número de Bond magnético (o número de Bond também é conhecido como número de Eötvös, principalmente na europa).

## Apêndice E

# Adams-Bashforth de dois passos com espaçamento variável

Deseja-se um Adams-Bashforth de dois passos com espaçamento variável no tempo da forma

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \Delta t^n A^n \mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n) + \Delta t^n B^n \mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1}), \quad (\text{E.1})$$

onde  $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$ ,  $\Delta t^n = \omega^n \Delta t^{n-1}$  e  $\mathbf{X}^n$  aproxima a solução do problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{X}(t)}{\partial t} = \mathbf{U}(t, \mathbf{X}), \\ \mathbf{X}(t^0) = \mathbf{X}^0. \end{cases}$$

Considerando-se  $\omega^k$  e  $\Delta t^0$  conhecidos, os coeficientes  $A^k$  e  $B^k$  do método são calculados como a seguir.

A derivada da função  $\mathbf{X}(t)$  é aproximada por uma interpolação linear:

$$\frac{\partial \mathbf{X}(t)}{\partial t} \approx P(t) = \frac{\mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n)(t - t^{n-1}) - \mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1})(t - t^n)}{\Delta t^{n-1}}.$$

Então o valor  $\mathbf{X}(t^{n+1})$  é aproximado por

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t^{n+1}) &= \mathbf{X}(t^n) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial \mathbf{X}(t)}{\partial t} dt \approx \mathbf{X}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} P(t) dt, \\ &= \mathbf{X}^n + \frac{\mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}^n)}{\Delta t^{n-1}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (t - t^{n-1}) dt - \frac{\mathbf{U}(t^{n-1}, \mathbf{X}^{n-1})}{\Delta t^{n-1}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (t - t^n) dt. \end{aligned}$$

Comparando-se com a expressão do método de Adams-Bashforth (E.1) determina-se que

$$A^n = \frac{1}{\Delta t^n \Delta t^{n-1}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (t - t^{n-1}) dt = 1 + \frac{\omega^n}{2},$$

e

$$B^n = -\frac{1}{\Delta t^n \Delta t^{n-1}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (t - t^n) dt = -\frac{\omega^n}{2}.$$

Expandindo-se

$$\Delta t^k \alpha = \mathbf{X}(t^n + \Delta t^n) - \mathbf{X}(t^n) - \left[ \Delta t^n \left( 1 + \frac{\omega^n}{2} \right) \mathbf{U}(t^n, \mathbf{X}(t^n)) + \Delta t^n \left( \frac{-\omega^n}{2} \right) \mathbf{U}(t^n - \Delta t^{n-1}, \mathbf{X}(t^n - \Delta t^{n-1})) \right]$$

em série de Taylor com centro em  $t = t^n$ , na qual  $\alpha$  é o erro local de truncamento tem-se

$$\Delta t^k \alpha = \left( \frac{(\Delta t^n)^3}{6} + \frac{(\Delta t^n)^2(\Delta t^{n-1})}{4\omega^n} \right) (\Delta t^n)^3 \mathbf{X}'''(\xi) = \left( \frac{1}{6} + \frac{1}{4\omega^n} \right) (\Delta t^n)^3 \mathbf{X}'''(\xi),$$

onde é assumido que  $\mathbf{X}'''(t)$  existe e  $\xi$  é um ponto entre  $t^{n-1}$  e  $t^{n+1}$ , logo  $\alpha = O((\Delta t^n)^2)$ .

## Referências Bibliográficas

- Adami et al. (2010)** S. Adami, X.Y. Hu e N.A. Adams. A conservative {SPH} method for surfactant dynamics. *Journal of Computational Physics*, 229(5):1909 – 1926. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2009.11.015>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109006342>. Citado na pág. 8
- Afkhami et al. (2008)** S. Afkhami, Y. Renardy, M. Renardy, J.S. Riffe e T. St Pierre. Field-induced motion of ferrofluid droplets through immiscible viscous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 610(1):363–380. Citado na pág. 9, 10, 18, 19, 82
- Afkhami et al. (2010)** S. Afkhami, A.J. Tyler, Y. Renardy, M. Renardy, T.G. St. Pierre, R.C. Woodward e J.S. Riffe. Deformation of a hydrophobic ferrofluid droplet suspended in a viscous medium under uniform magnetic fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 663:358–384. Citado na pág. 9, 18, 19, 70, 75, 77, 82, 84
- Alexiou et al. (2002)** Ch. Alexiou, R. Schmid, R. Jurgons, Ch. Bergemann, W. Arnold e F.G. Parak. Targeted tumor therapy with “magnetic drug targeting”: Therapeutic efficacy of ferrofluid bound mitoxantrone. Em Stefan Odenbach, editor, *Ferrofluids*, volume 594 of *Lecture Notes in Physics*, páginas 233–251. Springer Berlin Heidelberg. ISBN 978-3-540-43978-3. doi: 10.1007/3-540-45646-5\_12. URL [http://dx.doi.org/10.1007/3-540-45646-5\\_12](http://dx.doi.org/10.1007/3-540-45646-5_12). Citado na pág. 9
- Aris (1962)** Rutherford Aris. *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Prentice-Hall (Englewood Cliffs, NJ), 1st ed. Citado na pág. 16
- Ascher et al. (1995)** U.M. Ascher, S.J. Ruuth e B.T.R. Wetton. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(3):797–823. ISSN 0036-1429. Citado na pág. 12, 23, 36, 37, 99
- Azeredo (2007)** D. M. Azeredo. *Simulação numérica de uma função indicadora de fluidos tridimensional empregando refinamento de malhas*. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil. dissertação de mestrado. Citado na pág. 36
- Barakat (2009)** Nahla S Barakat. Magnetically modulated nanosystems: a unique drug-delivery platform. *Nanomedicine*, 4(7):799–812. Citado na pág. xii, 1, 2
- Bashtovoi et al. (2002)** V.G Bashtovoi, O.A Lavrova, V.K Polevnikov e L Tobiska. Computer modeling of the instability of a horizontal magnetic-fluid layer in a uniform magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 252(0):299 – 301. ISSN 0304-8853. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00598-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00598-X). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488530200598X>. Proceedings of the 9th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 9
- Bashtovoi et al. (2005)** Victor Bashtovoi, Georges Bossis, Pavel Kuzhir e Aleksandr Reks. Magnetic field effect on capillary rise of magnetic fluids. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 289(0):376 – 378. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.106>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304013320>. Proceedings of the 10th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 10

- Batchelor (2000)** George Keith Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press. Citado na pág. 13
- Bazhlekov et al. (2006)** Ivan B. Bazhlekov, Patrick D. Anderson e Han E.H. Meijer. Numerical investigation of the effect of insoluble surfactants on drop deformation and breakup in simple shear flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 298(1):369 – 394. ISSN 0021-9797. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcis.2005.12.017>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979705012658>. Citado na pág. 8
- Bell e Marcus (1992)** John B Bell e Daniel L Marcus. A second-order projection method for variable-density flows. *Journal of Computational Physics*, 101(2):334 – 348. ISSN 0021-9991. Citado na pág. 24
- Bell et al. (1989)** John B Bell, Phillip Colella e Harland M Glaz. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2): 257 - 283. ISSN 0021-9991. Citado na pág. 24, 37, 39
- Berger e Rigoutsos (1991)** M. Berger e I. Rigoutsos. An algorithm for point clustering and grid generation. *Systems, Man and Cybernetics, IEEE Transactions on*, 21(5):1278–1286. Citado na pág. 25
- Berger e Colella (1989)** M. J. Berger e P. Colella. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 82(1):64–84. Citado na pág. 25, 26, 27
- Berger e Olinger (1984)** Marsha J Berger e Joseph Olinger. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 53(3):484 – 512. ISSN 0021-9991. Citado na pág. 25, 26
- Berkovskići et al. (1993)** BM Berkovskići, VF Medvedev e MS Krakov. *Magnetic fluids: engineering applications*. Oxford University Press (Oxford and New York). Citado na pág. 8
- Bitter et al. (1937)** Francis Bitter, Trygve Dewey Yensen e Fritz Zwicky. *Introduction to ferromagnetism*. McGraw-Hill book Company, Incorporated. Citado na pág. 110
- Botsch e Kobbelt (2004)** Mario Botsch e Leif Kobbelt. A remeshing approach to multiresolution modeling. Em *Proceedings of the 2004 Eurographics/ACM SIGGRAPH symposium on Geometry processing*, SGP '04, páginas 185–192, New York, NY, USA. ACM. ISBN 3-905673-13-4. doi: 10.1145/1057432.1057457. URL <http://doi.acm.org/10.1145/1057432.1057457>. Citado na pág. 32
- Brannon-Peppas e Blanchette (2004)** Lisa Brannon-Peppas e James O. Blanchette. Nanoparticle and targeted systems for cancer therapy. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 56(11):1649 – 1659. ISSN 0169-409X. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.addr.2004.02.014>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X04001450>. Intelligent Therapeutics: Biomimetic Systems and Nanotechnology in Drug Delivery. Citado na pág. 1
- Brown et al. (2001)** D.L. Brown, R. Cortez e M.L. Minion. Accurate projection methods for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 168(2):464–499. Citado na pág. 39
- Brusentsov et al. (2002)** Nikolai A Brusentsov, Lev V Nikitin, Tatiana N Brusentsova, Anatoly A Kuznetsov, Felix S Bayburtkiy, Leonid I Shumakov e Nikolai Y Jurchenko. Magnetic fluid hyperthermia of the mouse experimental tumor. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 252(0):378 – 380. ISSN 0304-8853. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853\(02\)00634-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853(02)00634-0). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885302006340>. Proceedings of the 9th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 8

- Ceniceros (2003)** H. D. Ceniceros. The effects of surfactants on the formation and evolution of capillary waves. *Physics of Fluids*, 15(1):245–256. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1528940>. Citado na pág. 7, 14
- Ceniceros e Roma (2005)** H. D. Ceniceros e A. M. Roma. A multi-phase flow method with a fast, geometry-based fluid indicator. *Journal of Computational Physics*, 205(2):391–400. Citado na pág. 14, 35
- Ceniceros et al. (2010a)** H. D. Ceniceros, R. L. Nôs e A. M. Roma. Three-dimensional, fully adaptive simulations of phase-field fluid models. *Journal of Computational Physics*, 229(17): 6135–6155. Citado na pág. 5, 26, 38, 39
- Ceniceros et al. (2010b)** H. D. Ceniceros, A. M. Roma, A. Silveira-Neto e M. M. Villar. A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation. *Communications in Computational Physics*, 8(1):51–94. Citado na pág. 5, 14, 26, 36, 39, 40
- Ceniceros et al. (2010c)** H.D. Ceniceros, A.M. Roma, A. Silveira-Neto e M.M. Villar. A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation. *Communications in Computational Physics*, 8(1): 51–94. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-77950177924&partnerID=40&md5=c22b1e5e0b5bb2b6799a01102a9407d8>. Citado na pág. 13
- Chorin (1968)** Alexandre Joel Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762. Citado na pág. 23, 36, 37
- Chorin (1969)** Alexandre Joel Chorin. On the convergence of discrete approximations to the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 23(106):341–353. Citado na pág. 39
- Chorin e Marsden (1992)** Alexandre Joel Chorin e Jerrold E Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer New York, 3rd ed. Citado na pág. 12, 14, 23, 37, 99
- Dailey (2003)** J.P. Dailey. Treatment with magnetic fluids, Setembro 2 2003. URL <http://www.google.com.ar/patents/US6612311>. US Patent 6,612,311. Citado na pág. 4
- Dailey et al. (1999)** J.P Dailey, J.P Phillips, C Li e J.S Riffle. Synthesis of silicone magnetic fluid for use in eye surgery. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 194(1-3): 140 – 148. ISSN 0304-8853. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853\(98\)00562-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0304-8853(98)00562-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885398005629>. Citado na pág. xii, 4, 5
- do Carmo (1976)** Manfredo Perdigão do Carmo. *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. Prentice-Hall, 1st ed. Citado na pág. 102
- Dobson (2006)** Jon Dobson. Magnetic nanoparticles for drug delivery. *Drug Development Research*, 67(1):55–60. ISSN 1098-2299. doi: 10.1002/ddr.20067. URL <http://dx.doi.org/10.1002/ddr.20067>. Citado na pág. 11
- Douglas e Dupont (1971)** J. Douglas e T. Dupont. Alternating-direction Galerkin methods on rectangles. *Numerical Solution of Partial Differential Equations, II (SYNSPADE 1970)*, páginas 133–214. Citado na pág. 38
- Drumright-Clarke e Renardy (2004)** M. A. Drumright-Clarke e Y. Renardy. The effect of insoluble surfactant at dilute concentration on drop breakup under shear with inertia. *Physics of Fluids*, 16(1):14–21. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1628232>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/16/1/10.1063/1.1628232>. Citado na pág. 7



- Dziuk e Elliott (2007)** G. Dziuk e C. M. Elliott. Finite elements on evolving surfaces. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 27(2):262–292. doi: 10.1093/imanum/drl023. URL <http://imajna.oxfordjournals.org/content/27/2/262.abstract>. Citado na pág. 42
- E e Liu (1995)** Weinan E e Jian-Guo Liu. Projection method i: Convergence and numerical boundary layers. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(4):pp. 1017–1057. ISSN 00361429. URL <http://www.jstor.org/stable/2158507>. Citado na pág. 39
- E e Liu (2002)** Weinan E e Jian-Guo Liu. Projection method iii: Spatial discretization on the staggered grid. *Mathematics of Computation*, 71(237):pp. 27–47. ISSN 00255718. URL <http://www.jstor.org/stable/2698859>. Citado na pág. 39
- Eeckman et al. (2002)** Frederic Eeckman, André J Moës e Karim Amighi. Evaluation of a new controlled-drug delivery concept based on the use of thermoresponsive polymers. *International Journal of Pharmaceutics*, 241(1):113 – 125. ISSN 0378-5173. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0378-5173\(02\)00198-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0378-5173(02)00198-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378517302001989>. Citado na pág. 1
- Erhel et al. (1996)** Jocelyne Erhel, Kevin Burrage e Bert Pohl. Restarted {GMRES} preconditioned by deflation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 69(2):303 – 318. ISSN 0377-0427. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0377-0427\(95\)00047-X](http://dx.doi.org/10.1016/0377-0427(95)00047-X). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037704279500047X>. Citado na pág. 43
- Etrych et al. (2001)** Tomas Etrych, Marketa Jelinkova, Blanka Rihova e Karel Ulbrich. New {HPMA} copolymers containing doxorubicin bound via ph-sensitive linkage: synthesis and preliminary in vitro and in vivo biological properties. *Journal of Controlled Release*, 73(1):89 – 102. ISSN 0168-3659. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-3659\(01\)00281-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-3659(01)00281-4). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168365901002814>. Citado na pág. 1
- Euler (1755)** L Euler. Principes generaux de l'etat d'equilibre des fluides; principes generaux du mouvement des fluides; continuation des recherches sur la theorie du mouvement des fluides. *Histoire de l'Academie de Berlin*. Citado na pág. 13
- Feigl et al. (2007)** Kathleen Feigl, David Megias-Alguacil, Peter Fischer e Erich J. Windhab. Simulation and experiments of droplet deformation and orientation in simple shear flow with surfactants. *Chemical Engineering Science*, 62(12):3242 – 3258. ISSN 0009-2509. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2007.02.008>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250907001637>. Citado na pág. xiv, xv, 65, 66, 67, 68, 69
- Felderhof (2000)** B. U. Felderhof. Magnetoviscosity and relaxation in ferrofluids. *Phys. Rev. E*, 62:3848–3854. doi: 10.1103/PhysRevE.62.3848. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.62.3848>. Citado na pág. 10
- Felderhof e Kroh (1999)** B. U. Felderhof e H. J. Kroh. Hydrodynamics of magnetic and dielectric fluids in interaction with the electromagnetic field. *The Journal of Chemical Physics*, 110(15): 7403–7411. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.478642>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/110/15/10.1063/1.478642>. Citado na pág. 10
- Ferziger e Perić (1999)** J.H. Ferziger e M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*, volume 2. Springer Berlin. Citado na pág. 37
- Fleisch (2008)** Daniel Fleisch. *A Student's guide to Maxwell's equations*. Cambridge University Press. Citado na pág. 112
- Foos e Wheeler (1982)** Robert Y. Foos e Noel C. Wheeler. Vitreoretinal juncture: Synchysis senilis and posterior vitreous detachment. *Ophthalmology*, 89(12):1502 – 1512. ISSN 0161-6420. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0161-6420\(82\)34610-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0161-6420(82)34610-2). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0161642082346102>. Citado na pág. 3

- Freitas *et al.* (2005) Sergio Freitas, Hans P. Merkle e Bruno Gander. Microencapsulation by solvent extraction/evaporation: reviewing the state of the art of microsphere preparation process technology. *Journal of Controlled Release*, 102(2):313 – 332. ISSN 0168-3659. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jconrel.2004.10.015>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168365904004845>. Citado na pág. 6
- Frijters *et al.* (2012) Stefan Frijters, Florian Gunther e Jens Harting. Effects of nanoparticles and surfactant on droplets in shear flow. *Soft Matter*, 8:6542–6556. doi: 10.1039/C2SM25209K. URL <http://dx.doi.org/10.1039/C2SM25209K>. Citado na pág. 8
- Ganesan e Tobiska (2009) Sashikumaar Ganesan e Lutz Tobiska. A coupled arbitrary lagrangian-eulerian and lagrangian method for computation of free surface flows with insoluble surfactants. *Journal of Computational Physics*, 228(8):2859 – 2873. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.12.035>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109000047>. Citado na pág. 8
- Gottlieb e Orszag (1993) D. Gottlieb e S.A. Orszag. *Numerical analysis of spectral methods: theory and applications*, volume 26. Society for industrial and applied mathematics. Citado na pág. 38
- Grattan-Guinness (1990) Ivor Grattan-Guinness. *Convolutions in French Mathematics, 1800-1840: From the Calculus and Mechanics to Mathematical Analysis and Mathematical Physics. Vol. 2: The Turns*, volume 2. Springer. Citado na pág. 13, 14
- Griese (1999) M Griese. Pulmonary surfactant in health and human lung diseases: state of the art. *European Respiratory Journal*, 13(6):1455–1476. ISSN 1399-3003. doi: 10.1034/j.1399-3003.1999.13f36.x. URL <http://dx.doi.org/10.1034/j.1399-3003.1999.13f36.x>. Citado na pág. 6
- Haimann *et al.* (1982) Mark H Haimann, Thomas C Burton e Carl K Brown. Epidemiology of retinal detachment. *Archives of ophthalmology*, 100(2):289–292. Citado na pág. 4
- Hameed *et al.* (2008) M. Hameed, M. Siegel, Y. N. Young, J. Li, M. R. Booty e D.T. Papageorgiou. Influence of insoluble surfactant on the deformation and breakup of a bubble or thread in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 594:307. Citado na pág. 8, 60
- Harlow e Welch (1965) Francis H. Harlow e J. Eddie Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 8(12):2182–2189. Citado na pág. 24
- He *et al.* (2003) W. He, S. J. Lee, D. C. Jiles, D. H. Schmidt, M. D. Porter e R. Shinar. Design of high-magnetic field gradient sources for controlling magnetically induced flow of ferrofluids in microfluidic systems. *Journal of Applied Physics*, 93(10):7459–7461. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1557361>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/93/10/10.1063/1.1557361>. Citado na pág. 10
- Hoffman-Antenbrink *et al.* (2009) Margarethe Hoffman-Antenbrink, Brigitte Von Rechenberg e Heinrich Hofmann. Superparamagnetic nanoparticles for biomedical applications. Em M. C. Tan, editor, *Nanostructured Materials for Biomedical Applications*, páginas 119–149. Transworld Research Network. ISBN 978-81-7895-397-7. Citado na pág. xii, 2, 3
- Huang *et al.* (2008) H. Huang, M.C. Lai e H.C. Tseng. A parametric derivation of the surfactant transport equation along a deforming fluid interface. *Frontiers of applied and computational mathematics*, páginas 198–205. Citado na pág. 16, 103, 106, 107
- Huang e Russell (2011) Weizhang Huang e R Robert D Russell. *Adaptive moving mesh methods*, volume 174. Springer. Citado na pág. 30

- James e Lowengrub (2004)** Ashley J. James e John Lowengrub. A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant. *Journal of Computational Physics*, 201(2):685 – 722. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2004.06.013>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910400261X>. Citado na pág. 7
- Joseph (2006)** Daniel D. Joseph. Potential flow of viscous fluids: Historical notes. *International Journal of Multiphase Flow*, 32(3):285 – 310. ISSN 0301-9322. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2005.09.004>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932205001345>. Citado na pág. 14
- Kaufman et al. (2008)** Alex A. Kaufman, Richard O. Hansen e Robert L. Kleinberg. *Principles of the magnetic methods in geophysics*, volume 42. Access Online via Elsevier. Citado na pág. 70
- Khatri e Tornberg (2011)** Shilpa Khatri e Anna-Karin Tornberg. A numerical method for two phase flows with insoluble surfactants. *Computers & Fluids*, 49(1):150 – 165. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.05.008>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793011001678>. Citado na pág. 8
- Kim e Moin (1985)** J. Kim e P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59(2):308–323. Citado na pág. 37, 39
- Knieling et al. (2007)** Holger Knieling, Reinhard Richter, Ingo Rehberg, Gunar Matthies e Adrian Lange. Growth of surface undulations at the rosensweig instability. *Phys. Rev. E*, 76:066301. doi: 10.1103/PhysRevE.76.066301. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.76.066301>. Citado na pág. 10
- Korlie et al. (2008)** M.S. Korlie, A. Mukherjee, B.G. Nita, J.G. Stevens, A.D. Trubatch e P. Yecko. Modeling bubbles and droplets in magnetic fluids. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(20):204143. Citado na pág. 10, 18
- Kralova e Sjöblom (2009)** Iva Kralova e Johan Sjöblom. Surfactants used in food industry: A review. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 30(9):1363–1383. doi: 10.1080/01932690902735561. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01932690902735561>. Citado na pág. 6
- Laatikainen et al. (1985)** L. Laatikainen, E-M Tolppanen e H Harju. Epidemiology of rhegmatogenous retinal detachment in a finnish population. *Acta ophthalmologica*, 63(1):59–64. Citado na pág. 4
- Lai et al. (2011)** M.-C. Lai, C.-Y. Huang e Y.-M. Huang. Simulating the axisymmetric interfacial flows with insoluble surfactant by immersed boundary method. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 8(1):105–117. Citado na pág. 7
- Lai et al. (2008)** Ming-Chih Lai, Yu-Hau Tseng e Huaxiong Huang. An immersed boundary method for interfacial flows with insoluble surfactant. *Journal of Computational Physics*, 227(15):7279 – 7293. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2008.04.014>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999108002283>. Citado na pág. 7, 16, 60, 82, 103, 107
- Landau e Lifshitz (1984)** L. D. Landau e E. M. Lifshitz. *Electrodynamics of Continuous Media*, volume 8. Pergamon. ( Volume 8 of A Course of Theoretical Physics ). Citado na pág. 70, 112
- Landau e Lifshitz (1969)** LD Landau e EM Lifshitz. Mechanics, volume 1 of course of theoretical physics. *Butterworth-Heinemann, Oxford*. Citado na pág. 14
- Langevin (1905)** P. Langevin. Ferromagnetism. *Annales de Chimie et de Physique*, 5:70. Citado na pág. 18

- Larsson e Österlin (1985)** L. Larsson e S. Österlin. Posterior vitreous detachment. *Graefes Archive for Clinical and Experimental Ophthalmology*, 223(2):92–95. ISSN 0721-832X. doi: 10.1007/BF02150952. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02150952>. Citado na pág. 3
- Lavrova et al. (2004)** O. Lavrova, G. Matthies, V. Polevikov e L. Tobiska. Numerical modeling of the equilibrium shapes of a ferrofluid drop in an external magnetic field. *PAMM*, 4(1):704–705. ISSN 1617-7061. doi: 10.1002/pamm.200410333. URL <http://dx.doi.org/10.1002/pamm.200410333>. Citado na pág. 9
- Lavrova et al. (2006)** O. Lavrova, G. Matthies, T. Mitkova, V. Polevikov e L. Tobiska. Numerical treatment of free surface problems in ferrohydrodynamics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18(38):S2657. Citado na pág. 9, 18, 20
- Lee e Pozrikidis (2006)** Jaesung Lee e C. Pozrikidis. Effect of surfactants on the deformation of drops and bubbles in navier-stokes flow. *Computers & Fluids*, 35(1):43 – 60. ISSN 0045-7930. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2004.11.004>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793005000058>. Citado na pág. 7
- Lee et al. (2010)** Wah Keat Lee, Ruben Scardovelli, A. David Trubatch e Philip Yecko. Numerical, experimental, and theoretical investigation of bubble aggregation and deformation in magnetic fluids. *Phys. Rev. E*, 82:016302. doi: 10.1103/PhysRevE.82.016302. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.016302>. Citado na pág. 4
- Lenz et al. (2011)** M. Lenz, S. Nemaadjieu e M. Rumpf. A convergent finite volume scheme for diffusion on evolving surfaces. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(1):15–37. doi: 10.1137/090776767. URL <http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/090776767>. Citado na pág. 8, 11, 41, 42, 43, 58, 60
- Li e Pozrikidis (1997)** Xiaofan Li e C Pozrikidis. The effect of surfactants on drop deformation and on the rheology of dilute emulsions in stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 341(1): 165–194. Citado na pág. xv, 68, 69
- Limeira-Soares et al. (2006)** PH Limeira-Soares, RPC Lira, CEL Arieta e N Kara-Jose. Demand incidence of retinal detachment in brazil. *Eye*, 21(3):348–352. Citado na pág. 4
- Liu et al. (2005)** S.Q. Liu, Y.W. Tong e Yi-Yan Yang. Incorporation and in vitro release of doxorubicin in thermally sensitive micelles made from poly(n-isopropylacrylamide-co-n,n-dimethylacrylamide)-b-poly(d,l-lactide-co-glycolide) with varying compositions. *Biomaterials*, 26(24):5064 – 5074. ISSN 0142-9612. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.biomaterials.2005.01.030>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142961205000293>. Citado na pág. 1
- Lubbe et al. (2001)** Andreas S. Lubbe, Christoph Alexiou e Christian Bergemann. Clinical applications of magnetic drug targeting. *Journal of Surgical Research*, 95(2):200 – 206. ISSN 0022-4804. doi: <http://dx.doi.org/10.1006/jsre.2000.6030>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002248040096030X>. Citado na pág. 9
- Lübbe et al. (1996)** Andreas Stephan Lübbe, Christian Bergemann, Hanno Riess, Folke Schriever, Peter Reichardt, Kurt Possinger, Michael Matthias, Bernd Dörken, Friedhelm Herrmann, Renate Gürtler et al. Clinical experiences with magnetic drug targeting: a phase i study with 4-epidoxorubicin in 14 patients with advanced solid tumors. *Cancer research*, 56(20):4686–4693. Citado na pág. 1
- Machado (2005a)** Kleber Daum Machado. *Teoria do eletromagnetismo, vol.1*. Editora UEPG. Citado na pág. 112
- Machado (2005b)** Kleber Daum Machado. *Teoria do eletromagnetismo, vol.2*. Editora UEPG. Citado na pág. 112

- Martins (1975)** Nelson Martins. *Introdução à Teoria da Eletricidade e do Magnetismo*. Edgard Blucher. Citado na pág. 112, 114
- Massart (1981)** R. Massart. Preparation of aqueous magnetic liquids in alkaline and acidic media. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 17(2):1247-1248. ISSN 0018-9464. doi: 10.1109/TMAG.1981.1061188. Citado na pág. 8
- Massart et al. (1995)** R. Massart, E. Dubois, V. Cabuil e E. Hasmonay. Preparation and properties of monodisperse magnetic fluids. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 149(1-2):1 - 5. ISSN 0304-8853. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0304-8853\(95\)00316-9](http://dx.doi.org/10.1016/0304-8853(95)00316-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885395003169>. Proceedings of the Seventh International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 8
- Matthies e Tobiska (2005)** Gunar Matthies e Lutz Tobiska. Numerical simulation of normal-field instability in the static and dynamic case. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 289(0):346 - 349. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.098>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488530401323X>. Proceedings of the 10th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 10
- Mauch (2000)** S. Mauch. A Fast Algorithm for Computing the Closest Point and Distance Transform, Technical Report caltechASCI/2000.077. *Applied and Computational Math*. Citado na pág. 14, 35
- Mefford et al. (2007)** Olin T. Mefford, Robert C. Woodward, Jonathan D. Goff, T.P. Vadala, Tim G. St. Pierre, James P. Dailey e Judy S. Riffle. Field-induced motion of ferrofluids through immiscible viscous media: Testbed for restorative treatment of retinal detachment. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 311(1):347 - 353. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2006.10.1174>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885306025728>. <ce:title>Proceedings of the Sixth International Conference on the Scientific and Clinical Applications of Magnetic Carriers</ce:title> <ce:subtitle>SCAMC-06</ce:subtitle>. Citado na pág. xii, 2, 4, 6, 9, 81
- Meibod et al. (2010)** S.S.A. Meibod, P. Pourafshary e H.R.M. Hosseini. Study the effect of ultrasonic irradiation and surfactant/fe ions weight ratio on morphology and particle size of magnetite nanoparticles synthesised by co-precipitation for medical application. *World Academy of Science, Engineering and Technology*, 64:457-460. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-78651541014&partnerID=40&md5=a2fa758fa284a6849c5efef5a0c5fc1f>. cited By (since 1996)0. Citado na pág. 11
- Milnor e Stasheff (1974)** John W. Milnor e James D. Stasheff. *Characteristic classes*, volume 93. Princeton University Press Princeton. Citado na pág. 101, 102
- Minion (1996)** Michael L. Minion. A projection method for locally refined grids. *Journal of Computational Physics*, 127(1):158 - 178. Citado na pág. 24, 29
- Miura e Kimoto (2005)** H. Miura e M. Kimoto. A comparison of grid quality of optimized spherical hexagonal-pentagonal geodesic grids. *Monthly Weather Review*, 133(10):2817-2833. Citado na pág. 43
- Naletova et al. (2005a)** V.A. Naletova, V.A. Turkov, V.V. Sokolov e A.N. Tyatyuskin. The interaction of the particles of magnetizable suspensions with a wall (wall-adjacent effect) in uniform electric and magnetic fields. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 289(0):367 - 369. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.054>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304013290>. Proceedings of the 10th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 10



- Naletova et al. (2005b)** V.A. Naletova, V.A. Turkov e A.N. Tyatyushkin. Spherical body in a magnetic fluid in uniform electric and magnetic fields. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 289(0):370 – 372. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.104>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304013307>. Proceedings of the 10th International Conference on Magnetic Fluids. Citado na pág. 10
- Navier (1822)** CLMH Navier. On the laws of motion of fluids taking into consideration the adhesion of the molecules. *Ann. Chim. Phys*, 19:234–245. Citado na pág. 13
- Nós (2007)** R. L. Nós. *Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase*. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo. Citado na pág. 5, 26, 36, 40
- Nowak et al. (2014)** J. Nowak, F. Wiekhorst, L. Trahms e S. Odenbach. The influence of hydrodynamic diameter and core composition on the magnetoviscous effect of biocompatible ferrofluids. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(17):176004. URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/26/i=17/a=176004>. Citado na pág. 11
- Oberkampf e Trucano (2002)** William L. Oberkampf e Timothy G. Trucano. Verification and validation in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, 38(3):209 – 272. ISSN 0376-0421. Citado na pág. 52
- Osher e Fedkiw (2001)** S. Osher e R.P. Fedkiw. Level set methods: An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169(2):463–502. Citado na pág. 35
- Osher e Sethian (1988)** Stanley Osher e James A Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12 – 49. ISSN 0021-9991. Citado na pág. 13
- Pankhurst et al. (2003)** Q A Pankhurst, J Connolly, S K Jones e J Dobson. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36(13):R167. URL <http://stacks.iop.org/0022-3727/36/i=13/a=201>. Citado na pág. 1
- Pankhurst et al. (2009)** Q. A. Pankhurst, N. T. K. Thanh, S. K. Jones e J. Dobson. Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42(22):224001. URL <http://stacks.iop.org/0022-3727/42/i=22/a=224001>. Citado na pág. 8
- Paschalis et al. (2013)** Eleftherios I. Paschalis, James Chodosh, Ralph A. Sperling, Borja Salvador-Culla e Claes Dohlman. A novel implantable glaucoma valve using ferrofluid. *PLoS ONE*, 8(6):e67404. doi: 10.1371/journal.pone.0067404. Citado na pág. xii, 2, 3
- Pau et al. (2012)** G. S.H. Pau, J.B. Bell, A.S. Almgren, K. M. Fagnan e M.J. Lijewski. An adaptive mesh refinement algorithm for compressible two-phase flow in porous media. *Computational Geosciences*, 16(3):577–592. ISSN 1420-0597. doi: 10.1007/s10596-011-9270-2. Citado na pág. 35
- Peskin (1977)** C. S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3):220–252. Citado na pág. 15, 16, 35, 99
- Peskin (2002)** Charles S Peskin. The immersed boundary method. *Acta numerica*, 11(0):479–517. Citado na pág. 15, 16, 30, 34, 40
- Peyret e Taylor (1983)** Roger Peyret e Thomas D Taylor. Computational methods for fluid flow. Citado na pág. 24
- Pivello (2012)** M. R. Pivello. *A fully adaptive front tracking method for the simulation of 3D two-phase flows*. Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, Brasil. Citado na pág. 5, 26, 40



- Pivello et al. (2014)** M.R. Pivello, M.M. Villar, R. Serfaty, A.M. Roma e A. Silveira-Neto. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 58(0):72 – 82. ISSN 0301-9322. Citado na pág. 5, 8, 11, 14, 26, 36, 53, 82
- Popinet e Zaleski (1999)** S. Popinet e S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30:775–793. Citado na pág. 35
- Pozrikidis (2004)** C. Pozrikidis. A finite-element method for interfacial surfactant transport, with application to the flow-induced deformation of a viscous drop. *Journal of Engineering Mathematics*, 49(2):163–180. ISSN 0022-0833. doi: 10.1023/B:ENGI.0000017493.02877.4f. Citado na pág. 8, 11
- Pozrikidis (2011)** Constantine Pozrikidis. *Introduction to theoretical and computational fluid dynamics*. Oxford University Press. Citado na pág. 17, 65, 105, 108
- Raj e Moskowitz (1990)** K. Raj e R. Moskowitz. Commercial applications of ferrofluids. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 85(1-3):233 – 245. ISSN 0304-8853. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0304-8853\(90\)90058-X](http://dx.doi.org/10.1016/0304-8853(90)90058-X). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030488539090058X>. Citado na pág. 8
- Ramsey (2009)** Arthur Stanley Ramsey. *Electricity and magnetism: an introduction to the mathematical theory*. Cambridge University Press. Citado na pág. 110
- Regmi et al. (2009)** Rajesh Regmi, Correy Black, C. Sudakar, P. H. Keyes, Ratna Naik, G. Lawes, Prem Vaishnava, Cornel Rablau, David Kahn, Melissa Lavoie, Vijayendra K. Garg e A. C. Oliveira. Effects of fatty acid surfactants on the magnetic and magnetohydrodynamic properties of ferrofluids. *Journal of Applied Physics*, 106(11):113902. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3259382>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/106/11/10.1063/1.3259382>. Citado na pág. 11
- Renka (1984)** Robert J Renka. Interpolation of data on the surface of a sphere. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 10(4):417–436. Citado na pág. 31
- Renka (1988a)** Robert J. Renka. Multivariate interpolation of large sets of scattered data. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 14(2):139–148. ISSN 0098-3500. doi: 10.1145/45054.45055. URL <http://doi.acm.org/10.1145/45054.45055>. Citado na pág. 31
- Renka (1988b)** Robert J. Renka. Algorithm 660: Qshep2d: Quadratic shepard method for bivariate interpolation of scattered data. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 14(2):149–150. ISSN 0098-3500. doi: 10.1145/45054.356231. URL <http://doi.acm.org/10.1145/45054.356231>. Citado na pág. 31
- Reshetnyak (1993)** Yu. Grigor'evich Reshetnyak. *Geometry IV: Non-regular Riemannian Geometry*, volume 4. Springer. Citado na pág. 32
- Rinaldi et al. (2005)** Carlos Rinaldi, Arlex Chaves, Shihab Elborai, Xiaowei (Tony) He e Markus Zahn. Magnetic fluid rheology and flows. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 10(3-4):141 – 157. ISSN 1359-0294. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cocis.2005.07.004>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359029405000385>. Citado na pág. 10
- Roache (2009)** P.J. Roache. *Fundamentals of Verification and Validation*. Hermosa Publishers. ISBN 9780913478127. URL <http://books.google.com.br/books?id=uGdjyGAACA AJ>. Citado na pág. 52
- Roma et al. (1999)** Alexandre M. Roma, Charles S. Peskin e Marsha J. Berger. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 153(2):509 – 534. ISSN 0021-9991. Citado na pág. 4, 26, 28, 29, 37

- Roma (1996)** A.M. Roma. *A multilevel self adaptive version of the immersed boundary method*. Tese de Doutorado, New York University, New York, Estados Unidos. Citado na pág. 4, 26, 28
- Rosen e Kunjappu (2012)** Milton J Rosen e Joy T Kunjappu. *Surfactants and interfacial phenomena*. John Wiley & Sons. Citado na pág. 6, 7, 11
- Rosenberg (1997)** Steven Rosenberg. *The Laplacian on a Riemannian manifold: an introduction to analysis on manifolds*. Number 31. Cambridge University Press, 3rd ed. Citado na pág. 102
- Rosensweig (2001)** R.E. Rosensweig. Ferrofluids: Introduction. Em K.H. Jürgen Buschow, Robert W. Cahn, Merton C. Flemings, Bernhard Ilshner, Edward J. Kramer, Subhash Mahajan e Patrick Veyssi re, editors, *Encyclopedia of Materials: Science and Technology (Second Edition)*, p ginas 3093 – 3102. Elsevier, Oxford, second edition ed. ISBN 978-0-08-043152-9. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/B0-08-043152-6/00550-7>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B0080431526005507>. Citado na p g. 8
- Rosensweig (1996)** Ronald E Rosensweig. “*Conceptual Applications of Magnetic Fluids*”, in *Magnetic Fluids and Applications Handbook*. Courier Dover Publications. Berkovski, B. (Editor-in-Chief), Begell House, New York, pp.591-654. Citado na p g. 8
- Rosensweig (1997)** Ronald E Rosensweig. *Ferrohydrodynamics*. Courier Dover Publications. Citado na p g. 8, 11, 17, 18, 19, 110, 111, 112, 113
- Rowe et al. (1999)** Jonathan A Rowe, Jay C Erie, Keith H Baratz, David O Hodge, Darryl T Gray, Linda Butterfield e Dennis M Robertson. Retinal detachment in olmsted county, minnesota, 1976 through 1995. *Ophthalmology*, 106(1):154–159. Citado na p g. 4
- Sahr et al. (2003)** Kevin Sahr, Denis White e A. Jon Kimerling. Geodesic discrete global grid systems. *Cartography and Geographic Information Science*, 30(2):121–134. doi: 10.1559/152304003100011090. URL <http://dx.doi.org/10.1559/152304003100011090>. Citado na p g. 52, 82
- Saint-Venant (1843)** Barr  de Saint-Venant. Notea jointre au m moire sur la dynamique des fluides, pr sent  le 14 avril 1834. *Comptes-Rendus Hebdomadaires des S ances de l’Acad mie des Sciences*, 17:1240–1243. Citado na p g. 13
- Schepens e Bahn (1950)** CL Schepens e GC Bahn. Examination of the ora serrata: its importance in retinal detachment. *AMA archives of ophthalmology*, 44(5):677–690. Citado na p g. 3
- Schramm (2000)** Laurier L Schramm. *Surfactants: fundamentals and applications in the petroleum industry*. Cambridge University Press. Citado na p g. 6
- Scriven (1960)** L. E. Scriven. Dynamics of a fluid interface. *Chemical Engineering Science*, 12: 98. Citado na p g. 16
- Sherwood (2010)** Lauralee Sherwood. *Human Physiology: From Cells to Systems: From Cells to Systems*. Cengage Learning. Citado na p g. xii, 4
- Shi et al. (2014)** Dongxiao Shi, Qincheng Bi e Rongqi Zhou. Numerical simulation of a falling ferrofluid droplet in a uniform magnetic field by the voset method. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 66(2):144–164. doi: 10.1080/10407782.2013.869459. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10407782.2013.869459>. Citado na p g. 4, 9, 82
- Shin et al. (2005)** Seungwon Shin, S.I. Abdel-Khalik, Virginie Daru e Damir Juric. Accurate representation of surface tension using the level contour reconstruction method. *Journal of Computational Physics*, 203(2):493 – 516. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2004.09.003>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999104003894>. Citado na p g. 35

- Shliomis (2001a)** Mark I. Shliomis. Comment on “magnetoviscosity and relaxation in ferrofluids”. *Phys. Rev. E*, 64:063501. doi: 10.1103/PhysRevE.64.063501. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.063501>. Citado na pág. 10
- Shliomis (2001b)** Mark I. Shliomis. Ferrohydrodynamics: Testing a third magnetization equation. *Phys. Rev. E*, 64:060501. doi: 10.1103/PhysRevE.64.060501. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.060501>. Citado na pág. 10
- Shliomis (2002)** Mark I Shliomis. Ferrohydrodynamics: Retrospective and issues. Em *Ferrofluids*, páginas 85–111. Springer. Citado na pág. 10
- Singh e Shyy (2007)** Rajkeshar Singh e Wei Shyy. Three-dimensional adaptive cartesian grid method with conservative interface restructuring and reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 224(1):150–167. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2006.12.026>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910600622X>. Citado na pág. 60
- Spencer et al. (1970)** Louis M Spencer, Robert Y Foos e Bradley R Straatsma. Enclosed bays of the ora serrata: Relationship to retina tears. *Archives of ophthalmology*, 83(4):421–425. Citado na pág. 3
- Stokes (1845)** G.G. Stokes. On the theories of the internal friction of fluids in motion. *Trans. Cambridge Philos. Soc.*, 8:287–319. Mathematical and Physical Papers 1, 75–129. Citado na pág. 14
- Stone (1990)** H.A. Stone. A simple derivation of the time-dependent convective-diffusion equation for surfactant transport along a deforming interface. *Physics of Fluids A*, 2(1):111–112. Citado na pág. 16, 103, 106, 107
- Sunderland et al. (2006)** Christopher J. Sunderland, Matthias Steiert, James E. Talmadge, Austin M. Derfus e Stephen E. Barry. Targeted nanoparticles for detecting and treating cancer. *Drug Development Research*, 67(1):70–93. ISSN 1098-2299. doi: 10.1002/ddr.20069. URL <http://dx.doi.org/10.1002/ddr.20069>. Citado na pág. 1
- Séro-Guillaume et al. (1992)** O.E. Séro-Guillaume, D. Zouaoui, D. Bernardin e J.P. Brancher. The shape of a magnetic liquid drop. *Journal of Fluid Mechanics*, 241(1):215–232. Citado na pág. 18
- Tadmor et al. (2000)** R. Tadmor, R.E. Rosensweig, J. Frey e J. Klein. Resolving the puzzle of ferrofluid dispersants. *Langmuir*, 16(24):9117–9120. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-0034318866&partnerID=40&md5=0e4b19a626136d601ed046d8b60494e1>. cited By (since 1996)79. Citado na pág. 19
- Teigen e Munkejord (2010)** K.E. Teigen e S.T. Munkejord. Influence of surfactant on drop deformation in an electric field. *Physics of Fluids*, 22(11). URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-79251549207&partnerID=40&md5=cefefadb4df0c403e608c2bef3fcd85a>. Citado na pág. 7
- Teigen et al. (2010)** K.E. Teigen, K.Y. Lervag e S.T. Munkejord. Sharp interface simulations on surfactant-covered drops in electric fields. *J.C.F. Pereira, A. Sequeira, (Eds.)*. Citado na pág. 7
- Thacker et al. (2010)** William I. Thacker, Jingwei Zhang, Layne T. Watson, Jeffrey B. Birch, Manjula A. Iyer e Michael W. Berry. Algorithm 905: Sheppack: Modified shepard algorithm for interpolation of scattered multivariate data. *ACM Trans. Math. Softw.*, 37(3):34:1–34:20. ISSN 0098-3500. doi: 10.1145/1824801.1824812. URL <http://doi.acm.org/10.1145/1824801.1824812>. Citado na pág. 31
- Thurm e Odenbach (2003)** Steffen Thurm e Stefan Odenbach. Particle size distribution as key parameter for the flow behavior of ferrofluids. *Physics of Fluids (1994-present)*, 15(6):1658–1664. Citado na pág. 11

- Torchilin (2000)** Vladimir P Torchilin. Drug targeting. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 11, Supplement 2(0):S81 – S91. ISSN 0928-0987. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0928-0987\(00\)00166-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0928-0987(00)00166-4). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0928098700001664>. *Frontiers in Biopharmacy*. Citado na pág. 1
- Tryggvason et al. (2001)** G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas e Y.-J. Jan. A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708–759. Citado na pág. 13, 14, 19, 35
- Tryggvason e Scardovelli (2011)** Grétar Tryggvason e Ruben Scardovelli. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press. Citado na pág. 14, 19, 40
- Témam (1969)** R. Témam. Sur l'approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires (ii). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 33(5): 377–385. ISSN 0003-9527. Citado na pág. 23, 36
- Unverdi e Tryggvason (1992)** S. A. Unverdi e G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37. Citado na pág. 13, 14, 19, 35
- Van Kan (1986)** JJIM Van Kan. A second-order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(3):870–891. Citado na pág. 39
- Veguera e Dikansky (2005)** Janna G. Veguera e Yury I. Dikansky. Periodical structure in a magnetic fluid under the action of an electric field and with a shear flow. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 289(0):87 – 89. ISSN 0304-8853. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.025>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304012508>. *Proceedings of the 10th International Conference on Magnetic Fluids*. Citado na pág. 10
- Villar (2007)** M.M. Villar. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil. Citado na pág. 5, 26
- Voltairas et al. (2002)** P.A. Voltairas, D.I. Fotiadis e L.K. Michalis. Hydrodynamics of magnetic drug targeting. *Journal of Biomechanics*, 35(6):813 – 821. ISSN 0021-9290. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290\(02\)00034-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9290(02)00034-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929002000349>. Citado na pág. 9
- Wang e Ruuth (2008)** D. Wang e S.J. Ruuth. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, 26(6):838–855. Citado na pág. 12, 23, 36, 37, 38, 99
- Waxman (1984)** A. M. Waxman. Dynamics of a couple-stress fluid membrane. *Stud. Appl. Math.*, 70:63. Citado na pág. 16
- Weatherburn (1939)** C. E. Weatherburn. *Differential Geometry of Three Dimensions Vol. I*. Cambridge Univ. Press, Cambridge. UK. Citado na pág. 42, 105, 108
- Wong et al. (1996)** Harris Wong, David Rumschitzki e Charles Maldarelli. On the surfactant mass balance at a deforming fluid interface. *Physics of Fluids*, 8(11):3203–3204. doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.869098>. URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/8/11/10.1063/1.869098>. Citado na pág. 16, 106
- Xu e Tang (2006)** C. Xu e T. Tang. Stability analysis of large time-stepping methods for epitaxial growth models. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 44(4):1759–1779. doi: 10.1137/050628143. URL <http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/050628143>. Citado na pág. 38

- Xu et al. (2006)** Jian-Jun Xu, Zhilin Li, John Lowengrub e Hongkai Zhao. A level-set method for interfacial flows with surfactant. *Journal of Computational Physics*, 212(2):590 – 616. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.07.016>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105003475>. Citado na pág. 7
- Xu et al. (2012)** Jian-Jun Xu, Yin Yang e John Lowengrub. A level-set continuum method for two-phase flows with insoluble surfactant. *Journal of Computational Physics*, 231(17):5897 – 5909. ISSN 0021-9991. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.05.014>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112002562>. Citado na pág. 7
- Yang e James (2007)** X. Yang e A.J. James. An arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method for interfacial flows with insoluble surfactants. *Fluid Dynamics & Materials Processing*, 3:65–96. Citado na pág. 7
- Yokoi (2008)** K. Yokoi. A Numerical Method for Free-Surface Flows and Its Application to Droplet Impact on a Thin Liquid Layer. *Journal of Scientific Computing*, 35(2):372–396. Citado na pág. 15
- Yon e Pozrikidis (1998)** Steve Yon e C. Pozrikidis. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. *Computers & Fluids*, 27(8):879 – 902. ISSN 0045-7930. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930\(98\)00013-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7930(98)00013-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793098000139>. Citado na pág. 7
- Yue et al. (2012)** P. Yue, S. Lee, S. Afkhami e Y. Renardy. On the motion of superparamagnetic particles in magnetic drug targeting. *Acta Mechanica*, páginas 1–23. Citado na pág. 9, 18, 19
- Zaitsev e Shliomis (1968)** V.M. Zaitsev e M.I. Shliomis. The hydrodynamics of a ferromagnetic fluid. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 9(1):24–26. ISSN 0021-8944. doi: [10.1007/BF00923458](http://dx.doi.org/10.1007/BF00923458). URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF00923458>. Citado na pág. 10
- Zeytounian (2012)** Radyadour Kh Zeytounian. *Navier-Stokes-Fourier Equations: A Rational Asymptotic Modelling Point of View*. Springer. Citado na pág. 14
- Zhu et al. (2011)** G.P. Zhu, N.T. Nguyen, R.V. Ramanujan e X.Y. Huang. Nonlinear deformation of a ferrofluid droplet in a uniform magnetic field. *Langmuir*, 27(24):14834–14841. Citado na pág. 9, 18
- Ziolo et al. (1992)** Ronald F. Ziolo, Emmanuel P. Giannelis, Bernard A. Weinstein, Michael P. O'Horo, Bishwanath N. Ganguly, Vivek Mehrotra, Michael W. Russell e Donald R. Huffman. Matrix-mediated synthesis of nanocrystalline  $\gamma$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ : A new optically transparent magnetic material. *Science*, 257(5067):219–223. doi: [10.1126/science.257.5067.219](https://doi.org/10.1126/science.257.5067.219). URL <http://www.sciencemag.org/content/257/5067/219.abstract>. Citado na pág. 8



# Índice Remissivo

- célula
  - fantasma, 28
- campo
  - de velocidades, 69, 70, 75
  - magnético, 12, 65, 68, 70, 71, 74-76
- condições de contorno, 28
- conservação
  - numérica de massa de surfactante, 60
- DFT, *veja* transformada discreta de Fourier
- domínio
  - euleriano, 15
- DSP, *veja* processamento digital de sinais
- equação
  - de Navier-Stokes, 53
- equações
  - de Maxwell, 20, 21, 112
  - de Navier-Stokes, 14, 20
- escoamento
  - incompressível, 19, 21
- extrapolação de Richardson, 26
- extrapolação-interpolação cúbica, 29
- fase
  - contínua, 14, 70
  - dispersa, 14, 70
- ferrofluido, 12, 65, 68, 70, 75, 76
- fluido
  - bifásico, 19, 21
- força
  - magnética, 55
- Fourier
  - transformada, *veja* transformada de Fourier
- função
  - de Heaviside, 14
  - indicadora
    - de fluidos, 14
  - indicadora de fluidos, 14
- Método
  - da Projeção, 36
- método
  - da Fronteira Imersa, 15, 16, 20, 21
  - de acompanhamento de fronteira, 14
  - de Runge-Kutta, 66
  - de volumes finitos, 58
  - híbrido
    - front-tracking/front-capturing, 13
- número
  - de Bond magnético, 70, 75, 76
  - de capilaridade, 65, 66, 68, 76, 80
- nível
  - base, 28
- norma, 51
- permeabilidade magnética, 70, 75
- razão
  - de cisalhamento, 65, 75
  - de deformação de Taylor, 75, 80
  - de viscosidade, 65-69, 75, 76, 80
- Refinamento adaptativo de malhas, 25
- retalhos (*patches*), 25
- STFT, *veja* transformada de Fourier de tempo reduzido
- surfactante, 12, 65-69
- suscetibilidade magnética, 70, 75
- técnica
  - AMR, 25
  - TBP, *veja* periodicidade região codificante